# EL TEOREMA DEL VIRIAL EN MECÁNICA CUÁNTICA

El **teorema del virial** se demuestra en la mecánica clásica para obtener una relación estadística entre los valores medios de varias magnitudes mecánicas con respecto al tiempo.

Por ejemplo, la energía cinética media de un sistema general de masas puntuales con un vector de posición $\vec{r}_i$ cada una, sobre las que actúan fuerzas $\vec{F}_i$, se demuestra que es expresable como:

$$\overline{T} = -\frac{1}{2}\sum_i \overline{\vec{F}_i \cdot \vec{r}_i} = -\frac{1}{2}\sum_i \overline{\vec{r} \cdot \nabla \vec{V}_i}$$

donde $\overline{T}$ es la energía cinética media del conjunto de partículas, $\vec{F}_i$ es la fuerza que se aplica sobre la partícula *i* y $\vec{V}_i$ es el potencial externo que la provoca.

Para el caso en el que las partículas sean átomos o moléculas considerados como puntos ideales con masa fija, la ecuación de los gases ideales de Boyle es deducible a partir de este teorema.

La expresión del teorema de virial clásico en una sola dimensión se puede escribir fácilmente como:

$$\overline{T} = -\frac{1}{2} r \frac{d\overline{V}}{dr}$$

Considerando casos especialísimos, como que:

– se trate de una sola partícula que se mueva bajo la acción de una fuerza central

– el potencial se pueda expresar como una función de los módulos de los vectores de posición elevada a una potencia entera ($V=ar^{n+1}$)

– el exponente sea tal que la fuerza sea $F=r^n$

– las fuerzas sean inversamente proporcionales al cuadrado de la distancia

entonces se llega a la forma tradicional, que aparece frecuentemente como la única expresión del teorema del virial:

$$\overline{T} = -\frac{1}{2}\overline{V}$$

Como el potencial de un electrón solitario en el campo de un núcleo podría expresarse como

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

según vimos en la resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, y este es un caso en el que $r$ es unidimensional por tratarse de un campo central uniforme, entonces el teorema del virial tomaría la forma:

$$\overline{T} = -\frac{1}{2} r \frac{d\overline{V}}{dr} = -\frac{1}{2} r \left( \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \right) = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\overline{T} = -\frac{1}{2} \overline{V}$$

Debe observarse que el origen estadístico del teorema del virial clásico es perfectamente congruente con la naturaleza esencialmente estadística de la mecánica cuántica. Por ello, el caso muy particular en la mecánica clásica de que la energía cinética media duplique el valor absoluto de la potencial se hace aquí evidente, como puede observarse en la relación anterior.