Теорема о вириале, но не «теорема Вириала». Никакого учёного Вириала нет ☺, вириал – неодушевлённый ☺

Сабж:
$<T>=<\mathbf{r}\ \mathbf{grad}\ U(\mathbf{r})>$
Или, что то же самое,
$<T>=<\mathbf{r}\nabla U(\mathbf{r})>$.

Важный частный случай, который мы и будем использовать: $U(\mathbf{r})$ зависит только от r и степенным образом: $U(\mathbf{r}) = r^n$.
Тогда: $2<T>=n<V>$.

Пример. Найти $<1/r>$ и $<1/r^2>$ атома водорода для состояния $|nlm>$.
Отметим, что мы знаем ***явный вид*** для $|nlm>$-того состояния, они получены на введениях в кванты и атомке. Ничто не мешает нам воспользоваться формулой среднего значения:
$<1/r>=<nlm|1/r|nlm>$
$<1/r^2>=<nlm|1/r^2|nlm>$
Это всё сведётся к подсчёту интегралов по всему пространству в сферической СК.
Такой способ возможен, но явный вид ВФ уж слишком противен. Применим лучше теорему о вириале, чтобы не марать руки об интеграл:

Решение. Сначала найдём $<1/r>$:
Мы знаем, что
$<H>=E_{nlm}=\frac{-Ry}{n^2}$
Но $<H>=<T>+<U>$. Избавимся от $<T>$, выразив его через $<U>$.

Согласно теореме о вириале, $2<T>=-<U>$ (n=-1), $<T>=-<U>/2$.
Получаем $<H>=-<U>/2+<U>=<U>/2$.

$$\frac{<U>}{2}=\frac{-Ry}{n^2}$$

Распишем явный вид потенциальной энегии:

$$\frac{<e^2/r>}{2}=\frac{-Ry}{n^2}$$

Константы можно вынести за среднее. Также распишем явно Ридберга:

$$\frac{e^2<1/r>}{2}=\frac{-m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

Получаем ответ:

$$< 1/r >= \frac{-m_e e^2}{\hbar^2 n^2}$$

С $<1/r^2>$ хитрее (и там нам, кстати, теорема о вириале не пригодится). Давайте распишем подробно наш гамильтониан:

$$H[nlm >= \left(\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 \mathrm{L}(\mathrm{L}+1)}{2mr^2} + U(r)\right)[nlm >$$

Ну и где ты, $1/r^2$? А вот ты:

$$H[nlm >= \left(\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 \mathrm{L}(\mathrm{L}+1)}{2mr^2} + U(r)\right)[nlm >$$

Ты нам нужен: 

. А вот остальные нам слагаемые не нужны. Как бы от них избавиться…. Эврика! Давайте продифференцируем по L. Тогда «ненужные» слагаемые от L не зависят и их производные будут нулевые.

$$\frac{\partial}{\partial L}H[nlm] >= \frac{\partial}{\partial L}\left(\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 \mathrm{L}(\mathrm{L}+1)}{2mr^2} + U(r)\right)[nlm >$$

$$\frac{\partial}{\partial L}H[nlm] >= \left(\frac{\partial}{\partial L}\frac{\hbar^2 \mathrm{L}(\mathrm{L}+1)}{2mr^2}\right)[nlm >$$

Дифференцируем по L функцию L(L+1):

$$\frac{\partial}{\partial L}H[nlm] >= \left(\frac{\hbar^2(2\mathrm{L}+1)}{2mr^2}\right)[nlm >$$

А теперь можно и усреднять:

$$< \frac{\partial}{\partial L}H[nlm] > >=< \left(\frac{\hbar^2(2\mathrm{L}+1)}{2mr^2}\right)[nlm >>$$

Константы вынесем за знак среднего:

$$<\frac{\partial}{\partial L}H[nlm]>>=\frac{\hbar^2(2\mathrm{L}+1)}{2m}<\left(\frac{1}{r^2}\right)[nlm>>$$

Считаем левую часть.

$$<\frac{\partial}{\partial L}H[nlm]>>=\frac{\partial}{\partial L}<H[nlm]>>=\frac{\partial}{\partial L}\frac{-m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}=\frac{-m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{\partial}{\partial L}\frac{1}{n^2}$$

Если кто не помнит, в атоме водорода квантовое число n зависит от орбитального момента:

$$n=n_r+\ell+1$$

С учётом l=L/ ħ имеем

$$<\frac{\partial}{\partial L}H[nlm]>>=\frac{-m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{\partial}{\partial L}\frac{1}{n^2}==\frac{-m_e e^4}{2\hbar^3}\frac{\partial}{\partial l}\frac{1}{n^2}=\frac{m_e e^4}{2\mathrm{n}\hbar^3}$$

Получаем

$$\frac{m_e e^4}{2\mathrm{n}\hbar^3}=\frac{\hbar^2(2\mathrm{L}+1)}{2}<\left(\frac{1}{r^2}\right)[nlm>>$$

Откуда $<\left(\frac{1}{r^2}\right)[nlm>>=\frac{e^4}{2\mathrm{n}(2L+1)\hbar^5}$ – вот вам и среднее значение.