假设在空间中有另一组基函数`B'`，其与原始基函数`B`形状一致但方向不同，`B`所在的基坐标为`C`，`B'`所在的基坐标为`C'`，那么有：

$$C' = T \cdot C \tag{1}$$

其中`T`由`C'`的`x,y,z`单位列向量组成：$T = [e1, e2, e3]$

`B`包含(ψ_x, ψ_y, ψ_z)，其线性组成而成的波函数为：

$$\Psi = px \cdot \psi_x(r) + py \cdot \psi_y(r) + pz \cdot \psi_z(r) \tag{2}$$

其中`px,py,px`为组合系数，r为空间中的坐标点

`B'`包含$(\psi'_x, \psi'_y, \psi'_z)$，其线性组成而成的波函数为：

$$\Psi = px' \cdot \psi'_x(r) + py' \cdot \psi'_y(r) + pz' \cdot \psi'_z(r) \tag{3}$$

其中`px',py',px'`为组合系数

由于`B'`可以通过`B`旋转得到，函数的旋转等于函数内每个坐标点的旋转，因此公式3等于：

$$\Psi = px' \cdot \psi_x(T \cdot r) + py' \cdot \psi_y(T \cdot r) + pz' \cdot \psi_(T \cdot r) \tag{4}$$

对于p轨道高斯基函数，其数学形式为：

$$N \cdot x^l y^m z^n \cdot e^{-\alpha \cdot r^2} \tag{5}$$

其中`PX,PY,PZ`基函数对应的`(l,m,n)`分别为`(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)`，可知其与坐标为线性关系，可将T提出，则公式4可以简化为：

$$\Psi = T[px' \cdot \psi_x(r) + py' \cdot \psi_y(r) + pz' \cdot \psi_(r)] \tag{6}$$

因此$[px,py,pz]^T = T \cdot [px',py',pz']^T$ ，由于T为三个互相正交的单位列向量组成，因此$T^{-1} = T^T$，因此可得：

$$[px',py',pz'] = T^T \cdot [px,py,pz] \tag{7}$$

，其中:

$$pz' = e3 \cdot [px,py,pz] \tag{8}$$

，其中e3即为C'的z轴单位向量，也即是文中的n向量，该公式及等价于向量`[px,py,pz]`在n向量方向上的投影