Von Basis $|a\rangle$ ind Basis $|b\rangle$.

Die Beispiele beziehen sich auf einen Basiswechsel vom Orts- zum Impulsraum.

Schritt 1: Voraussetzungen

$$\Psi(a) = \langle a|\Psi\rangle$$

$$\langle a|A|\Psi\rangle = a\langle a|\Psi\rangle$$

$$\langle a|B|\Psi\rangle = B_a\langle a|\Psi\rangle$$

Hierbei ist B_a die Darstellung des Operators in der Basis $|a\rangle$
(Beispiel: $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ ist die Darstellung des Impulsoperators im Ortsraum)

$$\Psi(b) = \langle b|\Psi\rangle$$

$$\langle b|B|\Psi\rangle = b\langle b|\Psi\rangle$$

Schritt 2: Finden der Überlappfunktion

Die Überlappfunktion ist Eigenfunktion von A und B:

$$\begin{aligned}
&\langle a|b\rangle : \\
&\quad 1) A\langle a|b\rangle = a\langle a|b\rangle \qquad \rightarrow \quad A_a\langle a|b\rangle = a\langle a|b\rangle \\
&\quad 2) B\langle a|b\rangle = b\langle a|b\rangle \qquad \rightarrow \quad B_a\langle a|b\rangle = b\langle a|b\rangle
\end{aligned}$$

Die Überlappfunktion kann in jeder (beteiligten) Basis bestimmt werden.
Üblicherweise wird sie in $|a\rangle$ bestimmt.

(Beispiel: In Ortsdarstellung gilt: $\vec{r}\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\vec{r}\,\vec{p}/\hbar\right) = \vec{r}\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\vec{r}\,\vec{p}/\hbar\right)$ und
$\frac{\hbar}{i}\nabla_{\vec{r}}\left(\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\vec{r}\,\vec{p}/\hbar\right)\right) = \vec{p}\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\vec{r}\,\vec{p}/\hbar\right)$.
Somit ist $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\vec{r}\,\vec{p}/\hbar\right)$.)

Schritt 3: Finden der Wellenfunktion in der neuen Basis

Um die Wellenfunktion in der neuen Basis zu finden muss die Vollständigkeit der alten Basis $1 = \int|a\rangle\langle a|\mathrm{d}a$ genutzt werden:

$$\begin{aligned}
\Psi(b) &= \langle b|\Psi\rangle \\
&= \int\langle b|a\rangle\langle a|\Psi\rangle\mathrm{d}a \\
&= \int\langle a|b\rangle^*\langle a|\Psi\rangle\mathrm{d}a \\
&= \int b^*(a)\Psi(a)\mathrm{d}a
\end{aligned}$$

Hierbei sei anzumerken, dass die einzige Abhängigkeit von b in $b^*(a) = \langle b|a\rangle$ steckt.

Schritt 3: Finden des Operators A durch Koeffizientenvergleich

Um den Operator B in der neuen Basis zu bestimmen, genügt es dessen Eigenwertgleichung (aus Schritt 1) zu betrachten:

$$\langle b|B|\Psi\rangle = b\langle b|\Psi\rangle \qquad [= b\Psi(b)]$$

Für den Operator A muss die Vollständigkeit der Eigenbasis von A $1 = \int |a\rangle\langle a|\mathrm{d}a$ verwendet werden:

$$\begin{aligned} A_b\Psi(b) &= \langle b|A|\Psi\rangle \\ &= \int \langle b|a\rangle\langle a|A|\Psi\rangle \mathrm{d}a \\ &= \int a\,\langle a|b\rangle^*\langle a|\Psi\rangle \mathrm{d}a \end{aligned}$$

Durch "Koeffizientenvergleich" muss nun ein Operator gefunden werden, welcher auf $b^*(a) = \langle b|a\rangle$ angewendet {a} ergibt.
Zulässige Operationen sind beispielsweise die Ableitung nach b ∂_b oder Multiplikation mit b.
Da über a integriert wird, können Operationen, die nur von b abhängen vor das Integral gezogen werden und man findet:

$$A_b\Psi(b) = A_b\Big|_{a=A_b\langle b|a\rangle} \underbrace{\int b^*(a)\Psi(a)\mathrm{d}a}_{=\Psi(b)}$$

(Beispiel: $\vec{r}_{\vec{p}}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle^* = \vec{r}\cdot\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-i\vec{r}\vec{p}/\hbar\right) = i\hbar\nabla_{\vec{p}}\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-i\vec{r}\vec{p}/\hbar\right)$ Somit findet man die Darstellung des Ortsoperators in der Impulsbasis zu $\vec{r}_{\vec{p}} = i\hbar\nabla_{\vec{p}}$.)

Dieses Verfahren kann für alle in der alten Basis $|a\rangle$ gegebenen Operatoren angewendet werden.
Dabei muss dann u.U ein komplizierterer "Eigenwert" $O\Psi(a) = \langle a|\Psi\rangle = \langle a|O|\Psi\rangle$ berechnet und gefunden werden, die Schritte sind jedoch analog.