

W prezentowanej pracy zastanawiamy się nad możliwością stworzenia modelowego opisu tzw. kolizyjnie indukowanych (generowanych przez oddziaływania) własności układów molekularnych, hiper/polaryzowalności, poprzez kompilacje numerycznych, tzw. *ab initio*, metod ich obliczania z teoretycznym i analitycznym sposobem wyznaczania. Szczególną uwagę poświęcono tzw. kompleksom van der Waalasa zbudowanym z liniowej cząsteczki wodoru,  $H_2$ , i składnika o symetrii sferycznej, atomowego; w tej roli rozważamy wodór jednoatomowy. Przedstawione zostaną wyniki obliczeń *ab initio* kartezyjskich tensorów polaryzowalności oraz ich transformacje do formy składowych sferycznych. Wartości te będą następnie skonfrontowane z analitycznie otrzymanymi odpowiednikami w celu zmodyfikowania tych ostatnich poprzez uwzględnienie wkładów pochodzących od oddziaływań wymienionych oraz od kilku dodatkowych konfiguracji geometrycznych.