

Neaditívne medzimolekulové interakcie, ktoré zahŕňajú tri alebo viac molekúl, predstavujú významnú výzvu pri presnom predikovaní molekulárneho správania a vlastností materiálov. Tieto interakcie, ktoré sa vyznačujú vysokou dimenzionalitou a nepredvídateľnosťou v závislosti od polohy molekúl, nemožno spoľahlivo odhadnúť jednoduchým sčítaním párových interakcií medzi molekulami. Zahrnutie neaditívnych interakcií troch častíc do kvantovo-mechanických ab initio prístupov môže výrazne zlepšiť zhodu s experimentálnymi pozorovaniami.