พลังงานยึดเกาะแอนไอออนโดยสารประกอบ 1,3-บิส(4-ไนโตรฟีนิล) ยูเรีย หรือ รีเซ็ปเตอร์ **1** กับแอนไอออนเป็นตามลำดับดังนี้ CH_3COO^- > HCO_3^- > $C_6H_5COO^-$ > NO_2^- > $H_2PO_4^-$ > NO_3^- > HSO_4^- และ F^- > Cl^- > Br^- พลังงานยึดเกาะของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างสารประกอบเอไมด์วงแหวนจำนวน 6 รีเซ็ปเตอร์คือ **2**, **3**, **4**, **5**, **6** และ **7** กับไอออน F^-, Cl^-, Br^-, CH_3COO^-, HSO_4^- และ $H_2PO_4^-$ความสามารถการยึดเกาะแอนไอออนโดยรีเซ็ปเตอร์ทั้งหกเป็นลำดับดังนี้ F^- > CH_3COO^- > Br^- > $H_2PO_4^-$ > Cl^- > HSO_4^- สำหรับรีเซ็ปเตอร์ **2**, F^- > Br^- > CH_3COO^- > $H_2PO_4^-$ > Cl^- > HSO_4^- สำหรับรีเซ็ปเตอร์ **3** และ **4**, F^- > $H_2PO_4^-$ > CH_3COO^- ≈ Br^- > Cl^- > HSO_4^- สำหรับรีเซ็ปเตอร์ **5**, F^- > $H_2PO_4^-$ ≈ CH_3COO^- ≈ Br^- > Cl^- > HSO_4^- สำหรับรีเซ็ปเตอร์ **6** และ F^- > $H_2PO_4^-$ > Br^- > CH_3COO^- ≈ > Cl^- ≈ HSO_4^- สำหรับรีเซ็ปเตอร์ **7** พลังงานยึดเกาะแอนไอออนโดยสารประกอบเชิงซ้อน Li^+, Na^+ and K^+/คาลิก[4]เอรีน (**L** หรือ **8**) กับเฮไลด์ไอออน F^-, Cl^-, Br^-, ไอออนที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ HCO_3^-, HSO_4^- และ CH_3COO^- และค่าอุณหพลศาสตร์ของสารประกอบเชิงซ้อน LiL^+, NaL^+ และ KL^+ กับแอนไอออนเหล่านี้ได้รับการคำนวณ พลังงานยึดเกาะแอนไอออนโดย LiL^+, NaL^+ และ KL^+ เป็นลำดับดังนี้ F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > HSO_4^- > Cl^-, F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > Cl^- > HSO_4^- และ F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > Cl^- > HSO_4^- ตามลำดับ รีเซปเตอร์ LiL^+, NaL^+ และ KL^+ พบว่ามีความสามารถในการเลือกจับฟลูออไรด์ โครงสร้างของสารประกอบ 8,8'-บิส(3-ฟีนิลไธโอยูไรโดเมทิล)-2,2'-ไบแนบทัลลีน (**9**) 8,8'-บิส(3-บิวทิลไธโอยูไรโดเมทิล)-2,2'-ไบแนบทัลลีน (**10**) และสารประกอบเชิงซ้อนกับเกสต์ที่เป็นคาร์บอกซิเลต (อะซิเตต, ออกซาเลต, มัลโลเนต, ซัคซิเนต, กลูตาเรต, อะดิเพต, พิมีเลต, ซับเบอเลต และ อะซีเลต) และไอออนสารอินทรีย์ที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ (NO_3^-, SO_4^{2-}, HCO_3^-, HPO_4^{2-}, และ $H_2PO_4^-$) และเฮไลด์ไอออนได้รับการคำนวณ สารประกอบไดพิโคลิลยูเรียถูกพบว่ามีสี่โครงรูป และพบว่าโครงสร้างพันธะไฮโดรเจนแบบภายในโมเลกุลเป็นโครงรูปที่เสถียรที่สุด ค่าพลังงาน ค่าอุณหพลศาสตร์ ค่าคงที่อัตราเร็ว ค่าคงที่การเกิดสมดุลเคมี ของการเปลี่ยนแปลงโครงรูปได้รับการคำนวณ สารประกอบเชิงซ้อนกับกรดฟอร์มิก กรดน้ำส้ม กรดเบ็นโซอิก กรดออกซาลิก และแอนไอออนของกรดเหล่านี้ได้รับการสืบสวน ค่าพลังงาน ค่าอุณหพลศาสตร์ ค่าคงที่อัตราเร็ว ค่าคงที่การเกิดสมดุลเคมี ของการรวมตัวกันได้รับการคำนวณ

Binding energies of 1,3-bis(4-nitrophenyl)urea receptor **1** are in decreasing orders: CH_3COO^- > HCO_3^- > $C_6H_5COO^-$ > NO_2^- > $H_2PO_4^-$ > NO_3^- > HSO_4^- for oxygen-containing anions and F^- > Cl^- > Br^- for halide ions. Binding energies of complexes between six cyclic amide receptors **2**, **3**, **4**, **5**, **6** and **7** and anions F^-, Cl^-, Br^-, CH_3COO^-, HSO_4^- and $H_2PO_4^-$ and thermodynamic properties of these complexations were obtained. The binding abilities of these six receptors are in decreasing orders: F^- > CH_3COO^- > Br^- > $H_2PO_4^-$ > Cl^- > HSO_4^- for receptor **2**, F^- > Br^- > CH_3COO^- > $H_2PO_4^-$ > Cl^- > HSO_4^- for receptors **3** and **4**, F^- > $H_2PO_4^-$ > CH_3COO^- ≈ Br^- > Cl^- > HSO_4^- for receptor **5**, F^- > $H_2PO_4^-$ ≈ CH_3COO^- ≈ Br^- > Cl^- > HSO_4^- for receptor **6** and F^- > $H_2PO_4^-$ > Br^- > CH_3COO^- ≈ > Cl^- ≈ HSO_4^- for receptor **7**. Binding energies of Li^+, Na^+ and K^+/calix[4]arene (**L**, **8**) complexes and halide ions F^-, Cl^-, Br^-, oxygen–containing anions HCO_3^-, HSO_4^- and CH_3COO^- ions were obtained. Binding energies and thermodynamic properties of complex receptors LiL^+, NaL^+ and KL^+ with these anions were determined. Binding energies of receptors LiL^+, NaL^+ and KL^+ are in decreasing orders: F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > HSO_4^- > Cl^-, F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > Cl^- > HSO_4^- and F^- >> CH_3COO^- > HCO_3^- > Br^- > Cl^- > HSO_4^-. All the alkaline–metal receptors LiL^+, NaL^+ and KL^+exhibit their abilities to selectively fluoride ion. The structures of 8,8'-bis(3-phenylthioureidomethyl)-2,2'-binaphthalene (**9**), 8,8'-bis(3-butylthioureidomethyl)-2,2'-binaphthalene (**10**) and their complexes with anionic guests such as carboxylate ions (acetate, oxalate, malonate, succinate, glutarate, adipate, pimelate, suberate, and azelate), inorganic oxygen-containing anions (NO_3^-, SO_4^{2-}, HCO_3^-, HPO_4^{2-} and $H_2PO_4^-$), and halide ions were obtained. Four isomers of dipicolyl urea were obtained and the intramolecular hydrogen-bonded structure was found to be the most stable isomer. Energetics, thermodynamic properties, rate constants, and association constants of their isomerizations were obtained. Complexes of all isomers of dipicolyl urea with formic acid, acetic acid, benzoic acid, oxalic acid, and their deprotonated species were investigated. Energetics, thermodynamic properties, and rate constants of their associations were obtained. Stabilities of all complexes in terms of association constants of the most stable species were determined.