Electronic Supplementary Material (ESI) for New Journal of Chemistry. This journal is © The Royal Society of Chemistry and the Centre National de la Recherche Scientifique 2022

Supplementary Information

Double metal synergistic synthetic urea: A Electrocatalytic Study

Zhijia Zhang, Ling Guo*, Jinping Du, Yingjun Hou

Key Laboratory of Magnetic Molecules & Magnetic Information Materials, Ministry of Education, The School of Chemistry and Material Science, Shanxi Normal University, Taiyuan 030031, China



Figure S1 Different paths of urea synthesis on MoVN₆C, and the rate-limiting steps of each path are marked with red numbers.



Figure S2 Different paths of urea synthesis on $TaVN_6C$, and the rate-limiting steps of each path are marked with red numbers.



Figure S3 Different paths of urea synthesis on WVN_6C , and the rate-limiting steps of each path are marked with red numbers.



*N2	*NN	*NCO ₂ N	*NCOOHN	*NCON
*NCONH	*HNCONH	*HNCONH ₂	*H ₂ NCONH ₂	*NHCOON
	ကွင်းခွင်းခွင်း ကွင်းခွင်း ကွင့်ခွင်း ကွင့်ခွင်း ကွင့်ချင်		- ရင်စွင်စွင်စွင် - စွင်စွင်စွင် - စွင်စွင်စွင် - စွင့်စွင့်စွင်	
*NCOHN	*NCONH ₂	*NNH	*NNH ₂	*HNNH ₂
ုန်းနှင့်နှင့်နှင့် ကို မို့နော်နှင့် ကို နော်နော်နှင့် ကို နှင့် ကို နော်နိုင်		م م م م م م م م م م م م م م م م م م م		ر مَنْ حَنْ
*H ₂ NNH ₂	*H ₂ NNH ₂ -CO ₂	*H ₂ NNH ₂ -COOH	*HNNH	*N ₂ -CO ₂
	, 200 - 200 - 200 - 200			ر من
*N ₂ -COOH	*N ₂ -CO	*CO ₂	*COOH	*CO
		ကွင်းစွင်းစွင်းစွင် ကွင်းစွင်းစွင် ကွင့်စွင်းစွင်း ကွင့်စွင်းစွင်း		

Figure S4 Different paths of urea synthesis on ReVN₆C, and the rate-limiting steps of each path are marked with red numbers.

Table S1 There are 25 geometric structures corresponding to different paths of urea synthesis onMoVN₆C. Different shading colors (blue, orange, pink, green) represent four different paths.

*N2	*NN	*NCO ₂ N	*NCOOHN	*NCON
			, 2 ³	
*NCONH	*HNCONH	*HNCONH ₂	*H ₂ NCONH ₂	*NHCOON
	ကွင်းစွင်းစွင်းစွင် ကွင်းစွင်းစွင် ကွင်းစွင်းစွင်း ကွင့်စွင်းစွင်း		ကွင်တွင်တွင် ကျော်တွင်တွင် ကျော်တွင် ကျော်တွင် ကျော်တွင် ကျော်တွင် ကျော်တွင်	,
*NCOHN	*NCONH ₂	*NNH	*NNH ₂	*HNNH ₂

ဂရင်ရင်ရင်ရှင် ဂရင်ရင်ရင် ဂရင်ရင်ရင် ဂရင်ရင်ရင်ရင်				
*H ₂ NNH ₂	*H ₂ NNH ₂ -CO ₂	*H ₂ NNH ₂ -COOH	*HNNH	*N ₂ -CO ₂
		ر به مرفق میش میش مرفق میش میش رو میش میش رو میش میش رو میش		
*N ₂ -COOH	*N ₂ -CO	*CO ₂	*COOH	*CO

Table S2 There are 25 geometric structures corresponding to different paths of urea synthesis on $TaVN_6C$. Different shading colors (blue, orange, pink, green) represent four different paths.

*N2	*NN	*NCO ₂ N	*NCOOHN	*NCON
, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,			, व ⁸ व, 8 व व , 9 , 9 , 9 , 9 , 9 , 9 , 9 , 9 , 9 , 9	,
*NCONH	*HNCONH	*HNCONH ₂	*H ₂ NCONH ₂	*NHCOON
, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3,	က်နှင့်တွင်လ ကို	ر به محمد به م محمد به محمد به محمد به محمد به		, 200 - 200 090 - 200 , 200 - 200 , 200 - 200 , 200 - 200 , 200 - 200
*NCOHN	*NCONH ₂	*NNH	*NNH ₂	*HNNH ₂
				୵ୄ୶ଽ୕୶ଽ୕୶ଽ ୵୶ୢୖ୶ ୷ୖଡ଼ୄ ୖୣୄ୶ଡ଼୵ ୵ଌୢୖୄ୶ଡ଼ୣୄୖ୶ଡ଼ୄୡ୵
*H ₂ NNH ₂	*H ₂ NNH ₂ -CO ₂	*H ₂ NNH ₂ -COOH	*HNNH	*N2-CO2
	وه من شونی و معنی شود. من شود من شود من شود من شود من شود من شود. من شود من شود			,0 ² ,20,20,20, ,00,00,00,00,00, ,00,00,00,00,00,00,0
*N ₂ -COOH	*N ₂ -CO	*CO ₂	*COOH	*CO



Table S3 There are 25 geometric structures corresponding to different paths of urea synthesis onWVN6C. Different shading colors (blue, orange, pink, green) represent four different paths.



Table S4 There are 25 geometric structures corresponding to different paths of urea synthesis onReVN6C. Different shading colors (blue, orange, pink, green) represent four different paths.