

Table

Table 1 Bond lengths of TiO₂ cluster and TiO₂/GLM.

Bond	TiO ₂ cluster(Å)	TiO ₂ /graphene(Å)	TiO ₂ /MoS ₂ (Å)	TiO ₂ /C ₃ N ₄ (Å)	TiO ₂ /BP(Å)
1	1.745	1.754	1.751	1.788	1.757
2	1.744	1.754	1.753	1.759	1.792
3	2.001	2.003	2.003	1.959	2.011
4	2.008	1.993	1.992	1.999	1.926
5	2.076	2.037	2.049	2.021	2.033
6	2.084	2.040	2.042	2.035	1.979
7	1.868	1.870	1.879	1.876	1.890
8	1.858	1.870	1.856	1.868	1.854
9	1.640	1.647	1.642	1.660	1.641
10	1.643	1.647	1.663	1.650	1.702

Table 2 Bond angles of TiO₂ cluster and TiO₂/GLM.

Bond angle	TiO ₂ cluster	TiO ₂ /graphene	TiO ₂ /MoS ₂	TiO ₂ /C ₃ N ₄	TiO ₂ /BP
∠1	108.49°	110.58°	110.61°	109.91°	106.80°
∠2	96.85°	96.55°	96.79°	97.45°	97.40°
∠3	96.90°	96.73°	97.02°	96.79°	97.27°
∠4	86.37°	88.39°	88.35°	87.86°	89.03°
∠5	123.96°	123.45°	123.46°	120.08°	122.70°
∠6	124.86°	122.46°	123.46°	121.68°	118.68°
∠7	77.636°	78.291°	78.033°	80.359°	78.671°
∠8	77.425°	78.413°	78.433°	79.830°	82.301°