

Supporting Information

Towards computer-aided graphene covered $\text{TiO}_2\text{-Cu}/(\text{Cu}_x\text{O}_y)$ composite design for the purpose of photoinduced hydrogen evolution

Łukasz Lewandowski ¹, Agnieszka Gajewicz-Skrętna ², Tomasz Klimczuk ³, Grzegorz Trykowski ⁴, Kostiantyn Nikiforov ⁵, Wojciech Lisowski ⁶, Anna Gołabiewska ^{7*} and Adriana Zaleska-Medynska ⁸

¹Faculty of Chemistry, Department of Environmental Technology, University of Gdansk, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdansk, lukasz.lewandowski@phdstud.ug.edu.pl

²Laboratory of Environmental Chemometrics, Faculty of Chemistry, University of Gdansk, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdansk, agnieszka.gajewicz@ug.edu.pl

³Department of Solid State Physics, Faculty of Applied Physics and Mathematics, Gdansk University of Technology, 80-233 Gdansk, Poland; tomasz.kliczmuk@pg.edu.pl

⁴Instrumental Analyses Laboratory, Faculty of Chemistry, Nicolaus Copernicus University in Torun, 87-100, Torun, Poland, tryk@chem.umk.pl

⁵Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Laboratory of Surface Analysis, 01-224 Warszawa, knikiforov@ichf.edu.pl

⁶Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Laboratory of Surface Analysis, 01-224 Warszawa, wlisowski@ichf.edu.pl

⁷Correspondence: Faculty of Chemistry, Department of Environmental Technology, University of Gdansk, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdansk, anna.golabiewska@ug.edu.pl

⁸Faculty of Chemistry, Department of Environmental Technology, University of Gdansk, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdansk, adriana.zaleska-medynska.ug.edu.pl



Figure S1. Fluidised bed.

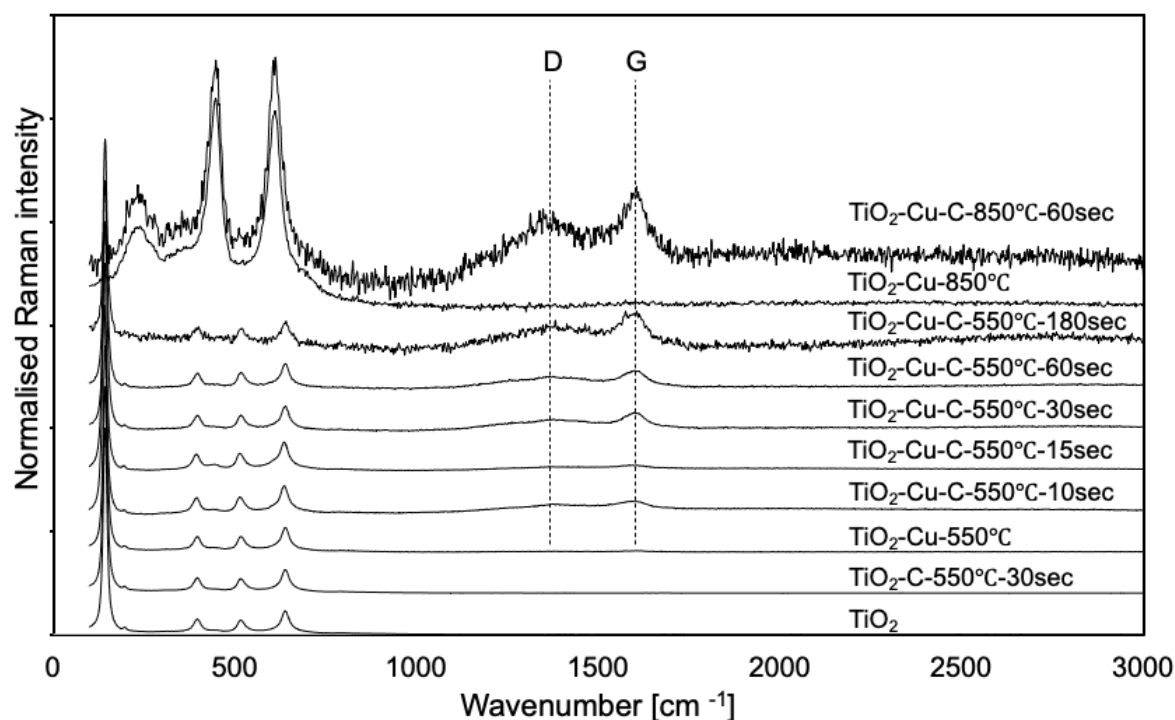


Figure S2. Raman spectrum of photocatalysts.

Table S1. Summary table of selected synthesis parameters and computational results (for the complete table with the predicted values, please refer to the supporting material).

Sample ID	Synthesis temperature [°C]	Synthesis time [sec]	Measured $\text{H}_2 \text{ h}^{-1} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1} [\mu\text{mol}]$	Set*	Predicted $\text{H}_2 \text{ h}^{-1} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1} [\mu\text{mol}]$
TiO ₂ - Cu-C-550-30s	550	30	2152.17	T	2117.96
TiO ₂ - Cu-C-500-30s	500	30	2151.66	T	2151.66
TiO ₂ - Cu-C-550-60s	550	60	2131.11	V	1756.58
TiO ₂ - Cu-C-550-30s	550	30	2108.27	T	2117.96
TiO ₂ - Cu-C-550-180s	550	180	2065.62	T	2065.62
TiO ₂ - Cu-C-550-10s	550	10	1897.72	V	1736.10
TiO ₂ - Cu-550-0s	550	0	1830.22	T	1710.44
TiO ₂ - Cu-C-600-0s	600	0	1807.05	T	1807.05
TiO ₂ - Cu-C-550-10s	550	10	1801.03	V	1736.10
TiO ₂ - Cu-C-550-60s	550	60	1761.61	T	1758.44
TiO ₂ - Cu-C-550-15s	550	15	1750.19	T	1768.04
TiO ₂ - Cu-C-550-45s	550	45	1731.25	V	1695.10
TiO ₂ - Cu-C-550-45s	550	45	1650.60	T	1679.48
TiO ₂ - Cu-550-0s	550	0	1589.50	T	1710.44
TiO ₂ - Cu-C-550-15s	550	15	1573.01	V	1777.31
TiO ₂ - Cu-C-600-30s	600	30	1141.38	T	1102.93
TiO ₂ - Cu-C-600-30s	600	30	1064.48	T	1102.93

TiO ₂ - Cu-850-0s	850	0	416.46	V	309.70
TiO ₂ - Cu-C-600-60s	600	60	404.70	T	404.70
TiO ₂ - Cu-850-0s	850	0	309.70	T	309.70
TiO ₂ - Cu-C-850-60s	850	60	29.92	T	29.92
TiO ₂ - Cu-C-500-25s	500	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.66</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-35s	500	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.66</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-20s	500	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.66</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-40s	500	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.66</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-15s	500	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.65</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-45s	500	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.64</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-50s	500	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.50</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-10s	500	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2151.48</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-55s	500	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2148.64</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-25s	550	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2070.75</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-35s	550	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2055.84</u>
TiO ₂ - Cu-C-500-60s	500	60	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>2054.90</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-20s	550	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1908.35</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-40s	550	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1851.73</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-10s	650	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1783.63</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-10s	700	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1783.63</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-10s	600	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1783.63</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-70s	550	70	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1761.52</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-55s	550	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1732.27</u>
TiO ₂ - Cu-C-550-50s	550	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1684.20</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-15s	600	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1337.64</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-15s	650	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1337.64</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-15s	700	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1337.64</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-20s	600	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1108.94</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-20s	650	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1108.94</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-20s	700	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1108.94</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-25s	600	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1103.04</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-25s	650	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1103.03</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-25s	700	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1103.03</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-30s	650	30	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1102.93</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-30s	700	30	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1102.93</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-35s	600	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1102.83</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-35s	650	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1102.83</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-35s	700	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1102.83</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-40s	600	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1096.98</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-40s	650	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1096.98</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-40s	700	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>1096.98</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-45s	600	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>870.20</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-45s	650	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>870.19</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-45s	700	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>870.19</u>

TiO ₂ - Cu-C-600-50s	600	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>427.93</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-50s	650	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>427.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-50s	700	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>427.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-600-55s	600	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>405.11</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-55s	650	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>405.11</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-55s	700	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>405.11</u>
TiO ₂ - Cu-C-650-60s	650	60	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>404.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-700-60s	700	60	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>404.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-10s	850	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-10s	750	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-10s	800	10	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-15s	850	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-15s	750	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-15s	800	15	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-20s	850	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-20s	800	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-20s	750	20	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.70</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-25s	850	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.62</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-25s	750	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.62</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-25s	800	25	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>309.62</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-30s	850	30	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>169.81</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-30s	750	30	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>169.81</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-30s	800	30	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>169.81</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-35s	850	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>30.00</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-35s	750	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>30.00</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-35s	800	35	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>30.00</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-40s	850	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-40s	750	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-40s	800	40	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-45s	850	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-45s	750	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-45s	800	45	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-50s	850	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-50s	750	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-50s	800	50	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-850-55s	850	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-55s	750	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-750-60s	750	60	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-55s	800	55	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
TiO ₂ - Cu-C-800-60s	800	60	<u>N/A</u>	<u>P</u>	<u>29.92</u>
