

Supplementary Materials

# Electronic Transport Properties of Silicane Determined from First Principles

We provide the input files used for the Quantum espresso self-consistent runs (scf.in), the phonon calculations (ph.in), the input for the transformation of the force constants to real space (q2r.in), the input file for the non-selfconsistent run (nscf.in), and the input file for the electron-phonon Wannier (EPW) code.

## 1. Self-consistent calculations file (scf.in):

```
&CONTROL
  calculation = 'scf',
  prefix = 'Silicane',
  wf_collect = .true.
  outdir = './',
  pseudo_dir = './',
  etot_conv_thr = 1.0d-6,
/
&SYSTEM
  ibrav = 0,
  a = 3.88717,
  nat = 4,
  ntyp = 2,
  ecutwfc = 50.0,
/
&ELECTRONS
  conv_thr = 1.0d-12,
  mixing_beta = 0.7,
/
&IONS
/
&CELL
/
CELL_PARAMETERS alat
  0.500000000  0.866025404  0.000000000
 -0.500000000  0.866025404  0.000000000
  0.000000000  0.000000000  5.144000000
ATOMIC_SPECIES
  Si  28.08550  Si.upf
  H   1.008    H.upf
ATOMIC_POSITIONS crystal
  H   0.000000000  0.000000000  0.000000000
  Si  0.000000000  0.000000000  0.075118000
  Si  0.333333333  0.333333333  0.111100000
  H   0.333333333  0.333333333  0.186218000
K_POINTS automatic
24 24 1 0 0 0
```

## 2. Phonon calculations file (ph.in):

phonons of silicane

```
&INPUTPH
```

```
outdir='./',
```

```
prefix='Silicane',
```

```
fildyn='Silicane.dyn',
```

```
ldisp=.true.,
```

```
fildvscf = 'dvscf',
```

```
nq1=12,
```

```
nq2=12,
```

```
nq3=1,
```

```
tr2_ph=1.0d-18,
```

```
/
```

### 3. Transformation of force constants to real space file (q2r.in):

```
&input
```

```
fildyn='Silicane.dyn', zasn='simple', flfrc='Silicane.fc'
```

```
/
```

### 4. Calculation onto a regular grid (nscf.in):

```
&CONTROL
```

```
calculation = 'nscf' ,
```

```
prefix = 'Silicane' ,
```

```
outdir = './' ,
```

```
pseudo_dir = './' ,
```

```
wf_collect = .false.,
```

```
/
```

```
&SYSTEM
```

```
ibrav = 0,
```

```
a = 3.88717,
```

```
nat = 4,
```

```

        ntyp = 2,
        ecutwfc = 50 ,
        nbnd = 9,
/
&ELECTRONS
        conv_thr = 1.0d-12 ,
        mixing_beta = 0.7 ,
/
&IONS
/
&CELL
/
CELL_PARAMETERS alat
    0.500000000    0.866025404    0.000000000
   -0.500000000    0.866025404    0.000000000
    0.000000000    0.000000000    5.144000000
ATOMIC_SPECIES
Si  28.08550  Si.upf
H   1.008    H.upf
ATOMIC_POSITIONS crystal
H    0.000000000    0.000000000    0.000000000
Si   0.000000000    0.000000000    0.075118000
Si   0.333333333    0.333333333    0.111100000
H    0.333333333    0.333333333    0.186218000
K_POINTS crystal
576
0.00000000  0.00000000  0.00000000  1.736111e-03
```

0.00000000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.00000000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03

0.04166667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.04166667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03

0.08333333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.08333333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03

0.12500000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.12500000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03

0.16666667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.16666667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03



0.20833333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.20833333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03

0.25000000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.25000000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03

0.29166667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.29166667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.33333333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03

0.37500000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.37500000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03

0.41666667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.41666667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03

0.45833333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.45833333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03

0.50000000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.50000000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03

0.54166667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.54166667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03



0.58333333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.58333333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03

0.62500000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.62500000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03

0.66666667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.66666667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.70833333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03

0.75000000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.75000000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03

0.79166667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.79166667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03

0.83333333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.83333333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03

0.87500000	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.87500000	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03

0.91666667	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.91666667	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.00000000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.04166667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.08333333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.12500000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.16666667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.20833333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.25000000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.29166667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.33333333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.37500000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.41666667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.45833333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.50000000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.54166667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.58333333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.62500000	0.00000000	1.736111e-03



0.95833333	0.66666667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.70833333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.75000000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.79166667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.83333333	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.87500000	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.91666667	0.00000000	1.736111e-03
0.95833333	0.95833333	0.00000000	1.736111e-03

### 5. Input file for the Electron-phonon Wannier (EPW) code (epw.in)

--

&inputepw

```
prefix      = 'Silicane'
amass(1)    = 28.08550,
amass(2)    = 1.008,
outdir      = './',
dvscf_dir   = './save'
elph        = .true.
kmaps       = .false.
epbwrite    = .true.
epbread     = .false.
epwwrite    = .true.
epwread     = .false.
ephwrite    = .true.
elecselfen  = .true.
nbndsub     = 9
nbndskip    = 0
asr_typ     = 'simple'
iverbosity  = 3
```

```
wannierize = .true.

num_iter   = 1500

iprint     = 2

! wdata(1) = 'bands_plot = .true.'

! wdata(2) = 'begin kpoint_path'

! wdata(3) = 'K 0.666666 0.333333 0.000000  G 0.000000 0.000000 0.000000'

! wdata(4) = 'G 0.000000 0.000000 0.000000  M 0.500000 0.000000 0.000000'

! wdata(5) = 'M 0.500000 0.000000 0.000000  K 0.666666 0.333333 0.000000'

! wdata(6) = 'end kpoint_path'

! wdata(7) = 'bands_plot_format = gnuplot'

! wdata(8)   = 'search_shells=500'

fsthick    = 4.0 ! eV

eptemp     = 300 ! K

degaussw   = 0.005 ! eV

efermi_read = .true.

fermi_energy = -2.28

nkf1       = 50

nkf2       = 50

nkf3       = 1

nqf1       = 50

nqf2       = 50

nqf3       = 1

nk1        = 24

nk2        = 24

nk3        = 1

nq1        = 12

nq2        = 12
```

$$nq3 = 1$$

/

19 cartesian

0.000000000000000E+00	0.000000000000000E+00	0.000000000000000E+00
-0.833333333333323E-01	0.481125224204926E-01	0.000000000000000E+00
-0.166666666666665E+00	0.962250448409852E-01	0.000000000000000E+00
-0.24999999999997E+00	0.144337567261478E+00	0.000000000000000E+00
-0.33333333333329E+00	0.192450089681970E+00	0.000000000000000E+00
-0.41666666666662E+00	0.240562612102463E+00	0.000000000000000E+00
0.49999999999994E+00	-0.288675134522956E+00	0.000000000000000E+00
-0.83333333333323E-01	0.144337567261478E+00	0.000000000000000E+00
-0.16666666666665E+00	0.192450089681970E+00	0.000000000000000E+00
-0.24999999999997E+00	0.240562612102463E+00	0.000000000000000E+00
-0.33333333333329E+00	0.288675134522956E+00	0.000000000000000E+00
0.58333333333326E+00	-0.240562612102463E+00	0.000000000000000E+00
-0.16666666666665E+00	0.288675134522956E+00	0.000000000000000E+00
-0.24999999999997E+00	0.336787656943448E+00	0.000000000000000E+00
0.66666666666659E+00	-0.192450089681970E+00	0.000000000000000E+00
0.58333333333326E+00	-0.144337567261478E+00	0.000000000000000E+00
0.74999999999991E+00	-0.144337567261478E+00	0.000000000000000E+00
0.66666666666659E+00	-0.962250448409852E-01	0.000000000000000E+00
0.66666666666659E+00	-0.277555756156289E-16	0.000000000000000E+00

