

# Formation Enthalpies and Entropies for Frenkel and Schottky Defects

The following table contains some numbers found in the literature. It is not complete, eventually it might get "fuller".

Illustration

## Schottky Disorder

Crystal	$H_F$ [eV]	$S_F$ [k]	$H_M$ Cation vacancy [eV]	$H_M$ Anion vacancy [eV]
LiF	2.5 <sup>1)</sup> 2.34 <sup>2), 3)</sup>	9.6 <sup>1)</sup>	0.7 <sup>1)</sup>	0.7 <sup>1)</sup>
LiCl	2.12 <sup>2), 3)</sup>			
LiBr	1.8 <sup>3)</sup>			
LiI	1,3 <sup>3)</sup>			
NaCl	2.3 <sup>1)</sup> , 2), 3)	6 <sup>1)</sup>	0.7 <sup>1)</sup>	1.0 <sup>1)</sup>
KCl	2.3 <sup>1)</sup> 2.26 <sup>3)</sup>	6.5 <sup>1)</sup>	0.7 <sup>1)</sup>	1.0 <sup>1)</sup>
KBr	2.4 <sup>1)</sup>	8.6 <sup>1)</sup>	0.6 <sup>1)</sup>	0.9 <sup>1)</sup>
CsI	1.9 <sup>1)</sup>	-	0.6 <sup>1)</sup>	0.3 <sup>1)</sup>
MgO	6.6 <sup>2)</sup>			
CaO	6.1			

## Frenkel Disorder

	$H_F$ [eV]	$S_F$ [k]	$H_m$ Anion interstitial [eV]	$H_M$ Anion vacancy [eV]
AgCl	1.6 <sup>2), 3)</sup>			
AgBr	1,20 <sup>3)</sup>			
$\beta$ - AgI	0,7 <sup>3)</sup>			
CaF <sub>2</sub>	2.7 <sup>1)</sup> 2.8 <sup>2), 3)</sup>	-	$\approx 1.0$ <sup>1)</sup>	0.6 <sup>1)</sup>
SrF <sub>2</sub>	2.3 <sup>1)</sup> 0.7 <sup>3)</sup>	-	0.8 <sup>1)</sup>	0.9 <sup>1)</sup>
BaF <sub>2</sub>	1.9 <sup>1)</sup>	-	0.7 <sup>1)</sup>	0.6 <sup>1)</sup>
PbF <sub>2</sub>	1.1 <sup>1)</sup>	-	-	-

<b>SrCl<sub>2</sub></b>	1.7 <sup>1)</sup>	-	-	-
<b>ZrO<sub>2</sub></b>	4.1 <sup>2)</sup>			
<b>UO<sub>2</sub></b>	3.4 <sup>2)</sup>			

- 1) From "[Hayes and Stoneham](#)"; Defects and Defect Processes in Nonmetallic Solids
- 2) [From University of Hull, Lectures](#)
- 3) [From Uni Lethbridge; California.](#)