

Mass transfer study of double diffusive natural convection in a two-dimensional enclosure during the physical vapor transport of mercurous bromide (Hg_2Br_2): Part II. Mass transfer

Sung Ho Ha[†]

Department of Chemical Engineering, Hannam University, Daejeon 34054, Korea

(Received July 12, 2023)

(Revised July 17, 2023)

(Accepted July 18, 2023)

Abstract The average Nusselt numbers in the source and crystal region for the variation of thermal Grashof number (Gr_t) in the range of $2.31 \times 10^4 \leq Gr_t \leq 4.68 \times 10^4$ are obtained through numerical simulations. It is shown the average Nusselt number in the crystal region is more than twice as large as the average Nusselt number in the source region. The average Nusselt number in the source region shows an increasing tendency with increasing the thermal Grashof number, Gr_t , while the average Nusselt number in the crystal region shows a decreasing tendency with increasing thermal Grashof number, Gr_t . For the variation of the solutal Grashof number (Gr_s) in the range of $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$, the average Sherwood number in the source region and crystal region tends to decrease as the solutal Grashof number, Gr_s , increases. The average Sherwood number in the crystal region is about four times greater than the average Sherwood number in the source region.

Key words Physical vapor transport, Hg_2Br_2

브로민화 수은(I)(Hg_2Br_2) 물리적 증착공정의 2차원 밀폐공간에서 이중확산 자연 대류에서의 물질전달 연구: Part II. 물질전달

하성호[†]

한남대학교 화학공학과, 대전, 34054

(2023년 7월 12일 접수)

(2023년 7월 17일 심사완료)

(2023년 7월 18일 게재확정)

요약 $2.31 \times 10^4 \leq Gr_t \leq 4.68 \times 10^4$ 의 범위에서 온도 Grashof 수(Gr_t)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Nusselt수를 나타내고 있다. 결정영역에서의 평균 Nusselt 수가 소스영역에서의 평균 Nusselt 수 보다 2배 이상 큰 것으로 나타나고 있다. 소스영역에서의 평균 Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 증가하는 경향을 보여주고 있으며, 반면에 결정영역에서의 평균 Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 감소하는 경향을 나타나고 있다. $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$ 의 범위에서 농도 Grashof 수(Gr_s)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Sherwood 수를 나타내고 있다. 소스영역과 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 농도 Grashof 수(Gr_s)가 증가함에 따라, 감소하는 경향을 보이고 있다. 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 소스영역에서의 평균 Sherwood 수보다 약 4배 정도 크다.

1. 서론

최근에는 탈륨비소셀렌화물(Tl_3AsSe_3), 염화수은(I)(Hg_2Cl_2) 및 브로민화수은(I)(Hg_2Br_2)에 대한 음향 광학 재료 및 신호 처리 광학의 응용에 많은 관심이 모아지고 있으며,

이로 인해 광범위한 연구가 이루어졌다[1-10]. 최근 재료 가공에서 중요한 주제 중 하나는 결합된 열 및 농도 대류에 관한 것이다. Yang and Zhao[11]는 다양한 기하학적 구조를 가진 직사각형 밀폐공간에서 이중 확산대류의 2차원 전산수치해석 연구를 했으며, Liu et al.[12]는 이중 확산대류 시스템에서 다중 이완 시간 격자 Boltzmann 모델을 사용하여 Dufour 및 Soret 효과를 수치해석의 연구를 진행했다. Chakkingal et al.[13]은 단일 원통형

[†]Corresponding author
E-mail: shha@hnu.kr

장애물이 있는 입방체 밀폐공간에서 유동흐름을 연구했으며, Meften[14]은 조건부 안정성의 관점에서 이중 확산대류에 대한 연구를 수행했다. Hamimid et al.[15]는 이중 확산 대류에 대한 부력 효과의 한계에 대하여 연구했으며, Chauhan et al.[16]은 사각형 밀폐공간에서 열-농도 대류에 대한 점성 소산의 영향을 연구했다. 거의 20년기간에 걸쳐, Kim et al.[17-27]은 밀폐된 결정성장 반응기에서 염화수은(I)(Hg₂Cl₂)과 브로민화수은(I)(Hg₂Br₂) 증기의 물리적 증착공정에서 증기상에서의 이동현상을 시스템적으로 전산수치해석 연구를 수행했다. Weaver and Viskanta[28]는 2차원 직사각형 밀폐공간에서, 고온 벽면에서 승화과정의 질량 플럭스와 저온 벽면에서 응축 과정의 질량 플럭스가 존재하는 이중확산 대류 확산대류 시스템을 전산수치해석으로 연구했다.

본 연구에서는 비선형(nonlinear) 및 커플링(coupling) 편미분 방정식과 관련된 2차원의 Navier-Stokes 지배방정식과 온도 편미분방정식, 농도 편미분방정식을 수치해석을 Patankar[29]의 SIMPLER(Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equations Revised) Algorithm을 이용하여, 밀폐된 결정성장 반응기에서 열 및 농도 대류(이중 확산대류)에 대한 유동흐름을 전산수치 해석하는 것이다.

2. 물리적 및 수학적 모델

Figure 1은 2차원, 종횡비(aspect ratio, Ar)가 Ar=1인 정사각형 밀폐공간에서, PVT(물리적 증기 수송) 결정성장 시스템을 설명하고 있다. 하나의 수직면이 고온으로 유지되는 소스영역(source region) 및 반대쪽 수직벽이 저온으로 유지되는 결정영역(crystal region)으로 지칭된다. 소스영역의 Hg₂Br₂(성분 A)는 결정영역으로 수송된다. Hg₂Br₂(성분 A)에 불용성인 불활성 운반 기체인 아르곤(성분 B)은 밀폐공간내에서 기체 상태로 존재한다.

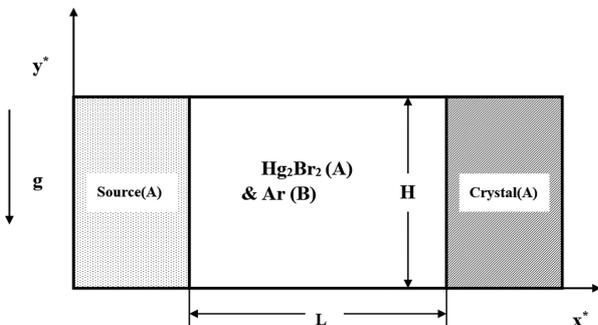


Fig. 1. System schematic descriptions and coordinates for two-dimensional numerical simulations of a PVT crystal growth enclosure of major component Hg₂Br₂ (A) and impurity argon (B).

이중확산 자연대류 시스템에 대한 수학적 모델에 대한 분석은 다음과 같은 가정을 기반으로 이루어진다.

- 유체는 Newtonian이며 비압축성이라고 가정한다.
- 유체는 층류로 가정한다.
- 2차원적 유동흐름이며, 정상상태라고 가정한다.
- 유체는 연속체로 거동하고 벽에서 no-slip 경계조건이라고 가정한다.
- 부력항의 밀도변화를 제외한 유체의 화학물리적 특성은 상수로 간주되며, 밀도는 이상기체법칙에 따른다.
- 복사 및 점성소산 효과는 무시한다.

2.1. 무차원 형태의 방정식

무차원변수:

$$\begin{aligned} x^* &= x/H, \quad y^* = y/H, \quad u = v_x/U, \quad v = v_y/U, \quad p^* = p/\rho_0 U^2, \\ T^* &= (T - T_c)/(T_h - T_c), \quad \omega_A^* = (\omega_A - \omega_{A,c})/(\omega_{A,s} - \omega_{A,c}), \\ U &= \alpha/H, \end{aligned}$$

여기서 x, y 는 각각 이동 길이와 밀폐공간의 높이에 따른 직각 좌표이고 p 는 압력이다. U 는 특성 속도이고 H 는 밀폐공간의 높이이다. 다음 지배 방정식에서 사용된 무차원 매개변수(Grashof 수, Gr ; Prandtl 수, Pr ; Lewis 수, Le ; Peclet 수; 농도 수, C_c)는 참고문헌[30-35]에서 찾을 수 있다. β 는 열부피 팽창계수이다. 질량농도 ω_A 는 다음과 같이 정의된다.

$$\omega_A = \frac{x_A M_A}{x_A M_A + x_B M_B}$$

여기에서, x 는 성분 A의 몰분율이며, M 은 혼합물의 평균 분자량이다.

무차원 변수를 적용하면 지배 방정식을 무차원 형식으로 표현한다:

$$\nabla^* \cdot \vec{V}^* = 0, \quad (1)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* = -\nabla^* p^* + Pr \nabla^{*2} \vec{V}^* - Gr \cdot Pr^2 \frac{(1 - \rho^*)}{\beta \Delta T}, \quad (2)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* T^* = \nabla^{*2} T^*, \quad (3)$$

$$\vec{V}^* \cdot \nabla^* \omega_A^* = \frac{1}{Le} \nabla^{*2} \omega_A^*. \quad (4)$$

관련 경계조건은 다음과 같이 표현된다.

용기벽면($0 < x^* < 1, y^* = 0$ and 1):

$$u(x^*, 0) = u(x^*, 1) = v(x^*, 0) = v(x^*, 1) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \omega_A^*(x^*, 0)}{\partial y^*} = \frac{\partial \omega_A^*(x^*, 1)}{\partial y^*} = 0,$$

$$T^*(x^*, 0) = -x^* + 1.$$

소스영역($x^* = 0, 0 < y^* < 1$):

$$u(0, y^*) = -\frac{1}{Le(C_v - 1)} \frac{\partial \omega_A^*(0, y^*)}{\partial x^*}, \quad (6)$$

$$v(0, y^*) = 0,$$

$$T^*(0, y^*) = 1,$$

$$\omega_A^*(0, y^*) = 1.$$

결정영역($x^* = 1, 0 < y^* < 1$):

$$u(1, y^*) = -\frac{1}{Le(C_v - 1)} \frac{\partial \omega_A^*(1, y^*)}{\partial x^*}, \quad (7)$$

$$v(1, y^*) = 0,$$

$$T^*(1, y^*) = 1,$$

$$\omega_A^*(1, y^*) = 1.$$

밀폐공간내 확산대류의 열전달은 무차원 Nusselt 수 $Nu_y = hH/k$ 및 평균 대류 Nusselt $Nu = -\int Nu_y(y^*) dy^*$, 국소 Nu_y 로 표현된다. 밀폐공간내 확산대류의 물질전달은 무차원 Sherwood 수 $Sh = h_m H / \rho D_{AB}$ 로 표현된다.

2.2. 수치해석방법

수치해석은 SIMPLER(Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equations Revised) Algorithm을 활용하였으며, x^*, y^* 방향으로 61×61 mesh를 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

Hg_2Br_2 의 분자량($M_A = 560.988 \text{ g/gmol}$)이 아르곤의 분자량($M_B = 39.944 \text{ g/gmol}$)과 같지 않을 때, 즉 $M_A \neq M_B$, 물리적 증기 수송 중 증기상에서의 물리적 증착공정에서의 이동현상은 열 및 농도 자연 대류와 소스 및 결정 인터페이스에서 $Hg_2Br_2(A)$ 의 질량 플럭스때문에 상당히 복잡하다. Table 1은 $Ar = 1, \Delta T = 30 \text{ K}, T_s = 290^\circ\text{C}$ 조건하에서, 브로민화수은(I) (Hg_2Br_2)의 물리적증착공정의 공정매개변수를 나열한 것이다. Table 2는 Table 1의 A 부터 E의 경우에 상응하는 평균 Nusselt와 Sherwood 수를 나열한 것이다. Table 1과 2에 사용된 무차원 수와 공정 매개변수는 참고문헌[24]에 수록되어 있다. 여기에서, 고려되는 종횡비(aspect ratio, $Ar, L/H$) = 1이다.

Figure 2는 농도 Grashof 수(Gr_s)와 아르곤(성분 B)의 부분압력, $P_B(\text{Torr})$ 의 관계를 설명하고 있다. 농도 Grashof 수(Gr_s)와 아르곤(성분 B)의 부분압력, $P_B(\text{Torr})$ 의 관계는 $100 \text{ Torr} \leq P_B \leq 500 \text{ Torr}$ 의 영역에서 직접이고 선형적으로 비례관계에 있으며, 287 Torr^{-1} 의 기울기를 가지고 있다. Figure 3은 $2.31 \times 10^4 \leq Gr_t \leq 4.68 \times 10^4$ 의 범위에서 온도 Grashof 수(Gr_t)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Nusselt 수를 나타내고 있다. 결정영역에서의 평균 Nusselt 수가 소스영역에서의 평균 Nusselt 수 보다 2배 이상 큰 것으로 나타나고 있다. 소스영역에서의 평균 Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 증가하는 경향을 보여주고 있으며, 반면에 결

Table 1
Process parameters for the physical vapor transport of mercurous bromide (Hg_2Br_2), based on $Ar = 1, \Delta T = 30 \text{ K}, T_s = 290^\circ\text{C}$

Case	Thermal Grashof number ($\times 10^4$), Gr_t	Solutal Grashof number ($\times 10^5$), Gr_s	Prandtl number, Pr	Lewis Number, Le	Peclet Number, Pe	Concentration Number, C_v	Partial Pressure of Component B, P_B (Torr)
A	2.31	3.28	0.89	0.54	1.1	1.4	100
B	2.73	3.44	0.82	0.84	0.9	1.67	200
C	3.28	3.73	0.79	1.1	0.76	1.86	300
D	3.94	4.07	0.77	1.31	0.67	2.03	400
E	4.68	4.43	0.75	1.49	0.60	2.2	500

Table 2
The average Nusselt and Sherwood numbers corresponding to Table 1

Case	Average Mass flux ($\times 10^{-4}$) (source region), ρV (g/cm ² sec)	Average Nusselt number (source region), Nu_s	Average Sherwood number (source region), Sh_s	Average Mass flux ($\times 10^{-4}$) (crystal region), ρV (g/cm ² sec)	Average Nusselt number (crystal region), Nu_c	Average Sherwood number (crystal region), Sh_c	$ U _{\max}$ (cm/sec)
A	10.9	1.8	21.6	10.3	11.1	43	17.75
B	6.92	2.61	16.5	6.92	7.79	29.9	13.88
C	5.24	2.88	14.6	5.01	6.47	24.6	11.7
D	4.29	2.96	13.6	4.10	5.71	21.7	10.35
E	3.66	2.97	13.1	3.49	5.19	19.8	9.3

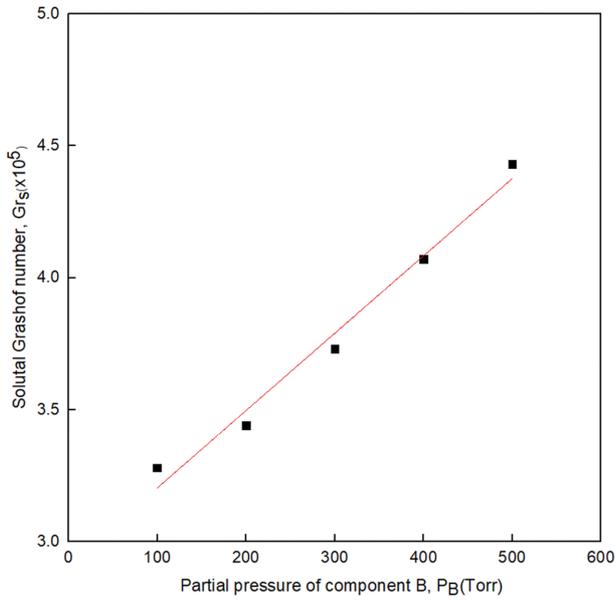


Fig. 2. The relationship of solutal Grashof number, Gr_s ($\times 10^5$) and partial pressure of component B, P_B (Torr).

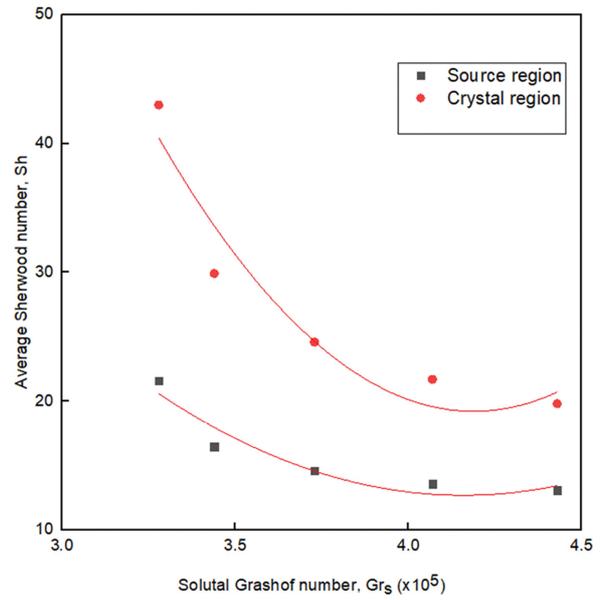


Fig. 4. The average Sherwood numbers for the source and crystal region as a function of the solutal Grashof number ($\times 10^5$), Gr_s .

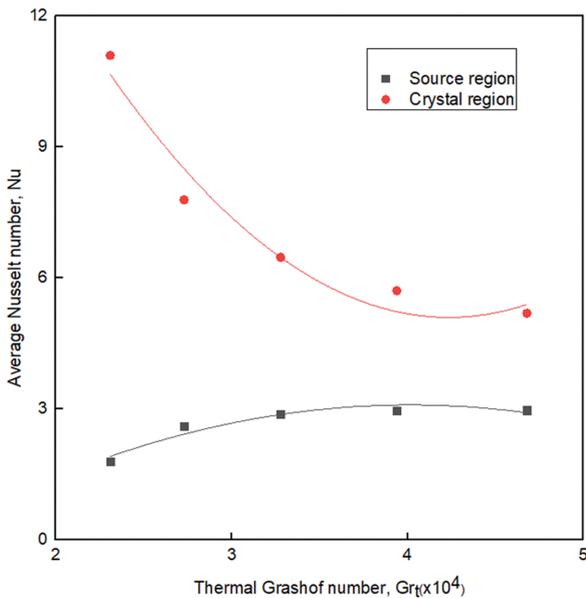


Fig. 3. The average Nusselt numbers for the source and crystal region as a function of the thermal Grashof number ($\times 10^4$), Gr_t .

정영역에서의 평균 Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 감소하는 경향을 나타나고 있다. 특히, Table 1을 참조하였을 때, case A, B의 온도 Grashof 수(Gr_t)의 영역에서, 평균 Nusselt 수는 급격히 감소하는 현상을 보여주고 있다.

Figure 4는 $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$ 의 범위에서 농도 Grashof 수(Gr_s)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Sherwood 수를 나타내고 있다. 소스영역과 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 농도 Grashof

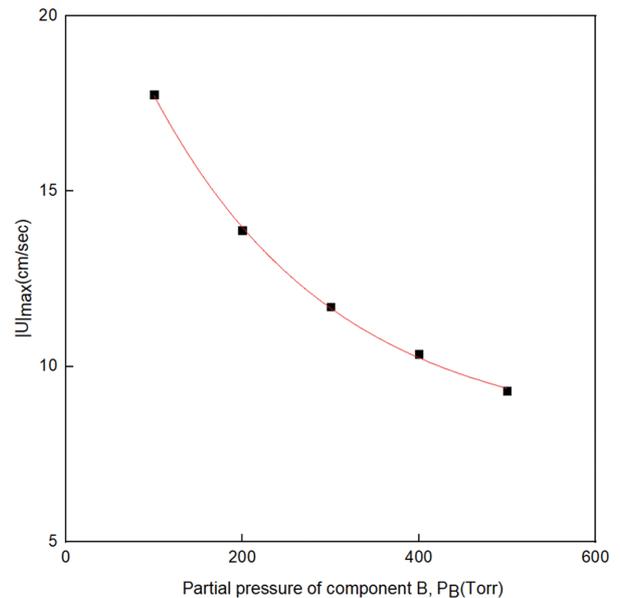


Fig. 5. The maximum magnitudes of velocity vector, $|U|_{max}$ (cm/sec) as a function of the partial pressure of component B, P_B (Torr).

수(Gr_s)가 증가함에 따라, 감소하는 경향을 보이고 있다. Table 1과 2를 참조하면, 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 소스영역에서의 평균 Sherwood 수보다 약 4배 정도 크다.

Figure 5는 $100 \text{ Torr} \leq P_B \leq 500 \text{ Torr}$ 의 범위에서, 아르곤(성분 B)의 부분압력, P_B (Torr)가 최대 속도 벡터의 크기 $|U|_{max}$ (cm/sec)에 미치는 영향을 설명하고 있다. Figure 5에서 보는 바와 같이, 최대 속도 벡터의 크기

$|U_{\max}(\text{cm/sec})$ 는 아르곤(성분 B)의 부분압력, $P_B(\text{Torr})$ 에 1차원적 지수적(exponentially)으로 감소한다. 최대 속도 벡터의 크기 $|U_{\max}(\text{cm/sec})$ 는 밀폐공간내에서의 대류의 크기를 의미한다.

Figure 6은 $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$ 의 범위에서 농도 Grashof 수(Gr_s)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스 $\rho V(\text{g/cm}^2\text{sec})$ 를 나타내고 있

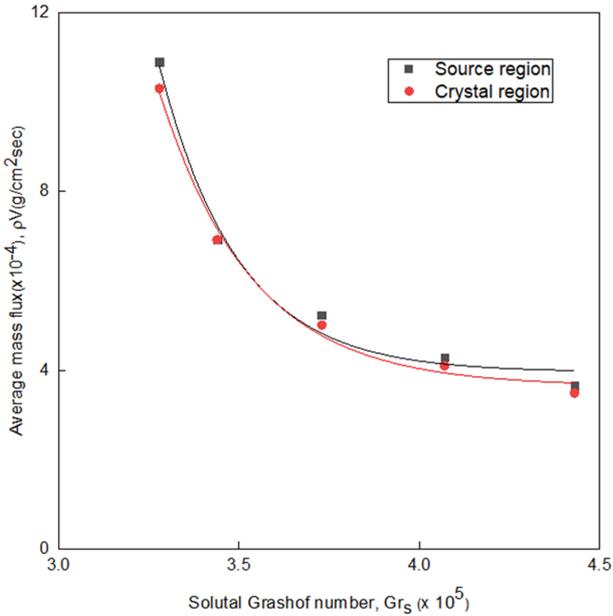


Fig. 6. Average mass flux ($\times 10^{-4}$), ρV ($\text{g/cm}^2\text{sec}$) for the source and crystal region as a function of the solutal Grashof number ($\times 10^5$), Gr_s .

다. 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스는 농도 Grashof 수(Gr_s)가 증가함에 따라, 지수적으로 감소하고 있다. Table 1과 2에서 보는 바와 같이, 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스는 거의 변화가 없으며, 같은 order 범위에 있다.

Figure 7은 소스와 결정영역에서의 무차원 $y^*(y/H)$ 에서의 Nusselt 수를 나타내고 있다. Figure 7에서 보면, 소스영역에서 Nusselt 수는 무차원 $y^*(y/H)$ 의 $0 \leq y^*(y/H) \leq 1$ 범위에서 Nusselt 수는 완만히 증가하고 있다. 결정영역에서는 $y^*(y/H) = 0.3$ 근처에서 최대의 Nusselt 수를 가지고 있으면, 이 지점을 변곡점으로 하여 Nusselt 수가 증가하다가 갑자기 감소하기 시작한다. Figure 8은 소스와 결정영역에서의 무차원 $y^*(y/H)$ 에서의 Sherwood 수를 나타내고 있다. Figure 8에서 보면, 소스영역에서 Sherwood 수는 무차원 $y^*(y/H)$ 의 $0 \leq y^*(y/H) \leq 1$ 범위에서 Sherwood 수는 비교적 가파르게 증가하고 있다. 결정영역에서 Sherwood 수는 무차원 $y^*(y/H)$ 의 $0 \leq y^*(y/H) \leq 0.2$ 범위에서 Sherwood 수는 비교적 변화가 없다가, $y^*(y/H) = 0.2$ 이후부터 급격히 감소한다. Figure 7과 Fig. 8은 Table 1에서의 case A: $Gr_t = 2.31 \times 10^4$, $Gr_s = 3.28 \times 10^5$, $Pr = 0.89$, $Le = 0.54$, $Pe = 1.1$, $C_v = 1.4$, $P_B = 100 \text{ Torr}$, $Ar = 1$, $\Delta T = 30 \text{ K}$, $T_s = 290^\circ\text{C}$ 의 조건에 기초한 것이다.

Figure 9는 속도벡터분포($|U_{\max} = 17.75 \text{ cm/s}$), 스트림 라인($\psi_{\min} = 0$, $\psi_{\max} = 31.5$, $\delta\psi = 4$), 등온선($\delta T^* = 0.18$), 등농도선($\delta\omega^* = 0.18$)을 보여주고 있다. Figure 9는 Table 1의 case A를 기초로 한 것이며, 이에 상응하는 공정매

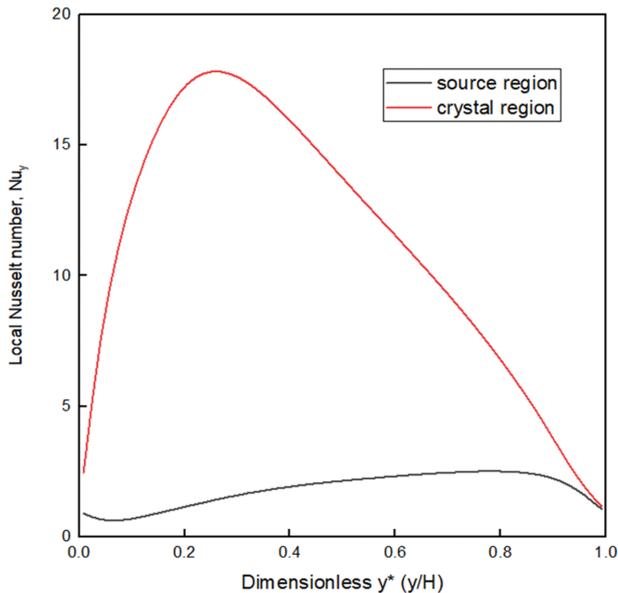


Fig. 7. Variation of the local Nusselt number, Nu_y (base case A: $Gr_t = 2.31 \times 10^4$, $Gr_s = 3.28 \times 10^5$, $Pr = 0.89$, $Le = 0.54$, $Pe = 1.1$, $C_v = 1.4$, $P_B = 100 \text{ Torr}$, $Ar = 1$, $\Delta T = 30 \text{ K}$, $T_s = 290^\circ\text{C}$ at the source and crystal region.

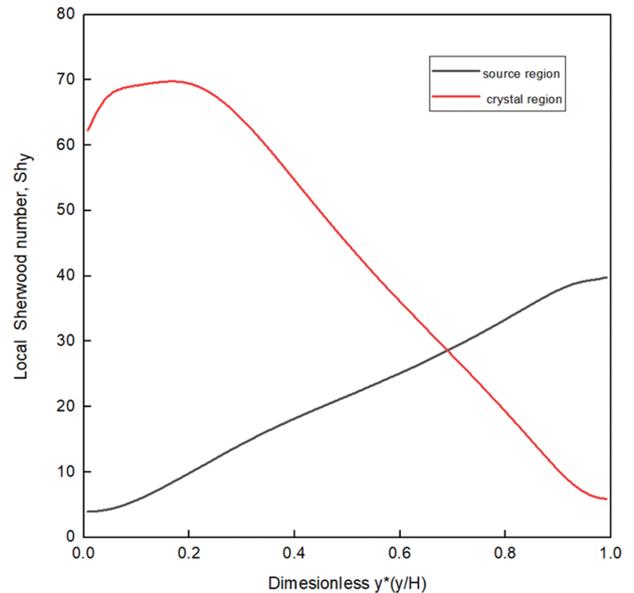


Fig. 8. Variation of the local Sherwood number, Sh_y (base case A: $Gr_t = 2.31 \times 10^4$, $Gr_s = 3.28 \times 10^5$, $Pr = 0.89$, $Le = 0.54$, $Pe = 1.1$, $C_v = 1.4$, $P_B = 100 \text{ Torr}$, $Ar = 1$, $\Delta T = 30 \text{ K}$, $T_s = 290^\circ\text{C}$ at the source and crystal region.

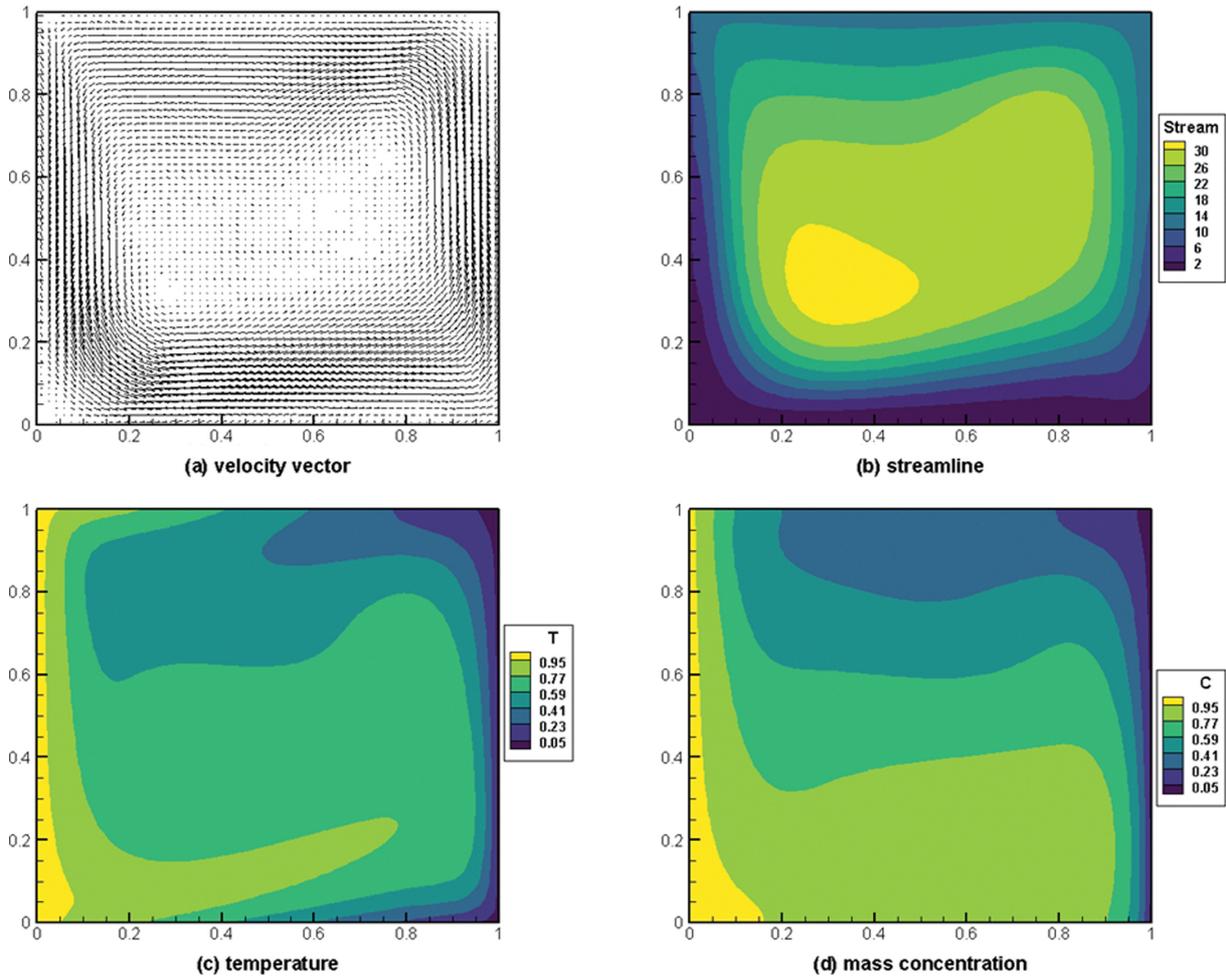


Fig. 9. (a) velocity vector fields ($|U|_{\max} = 17.75$ cm/s), (b) streamlines ($\psi_{\min} = 0$, $\psi_{\max} = 31.5$, $\delta\psi = 4$), (c) isotherms ($\delta T^* = 0.18$), (d) iso-mass concentrations ($\delta\omega^* = 0.18$), for case A of Table 1: $Gr_t = 2.31 \times 10^4$, $Gr_s = 3.28 \times 10^5$, $Pr = 0.89$, $Le = 0.54$, $Pe = 1.1$, $C_v = 1.4$, $P_B = 100$ Torr, $Ar = 1$, $\Delta T = 30$ K, $T_s = 290^\circ\text{C}$.

개변수는 $Gr_t = 2.31 \times 10^4$, $Gr_s = 3.28 \times 10^5$, $Pr = 0.89$, $Le = 0.54$, $Pe = 1.1$, $C_v = 1.4$, $P_B = 100$ Torr, $Ar = 1$, $\Delta T = 30$ K, $T_s = 290^\circ\text{C}$ 이다. Figure 9는 밀폐공간내에서 속도벡터분포도, 스트림라인 분포도를 통하여, 1개의 대류 셀(convective cell)이 존재함을 보여주고 있으며, $x^* = 0.5$ 기준으로 볼 때, 비대칭현상을 보여주고 있는데, 이것은 확산에 의한 물질전달의 크기보다는 대류현상에 의한 물질전달의 크기가 크다는 것을 의미한다.

4. 결 론

$2.31 \times 10^4 \leq Gr_t \leq 4.68 \times 10^4$ 의 범위에서 온도 Grashof 수(Gr_t)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Nusselt 수를 나타내고 있다. 결정영역에서의 평균 Nusselt 수가 소스영역에서의 평균 Nusselt 수 보다 2배 이상 큰 것으로 나타나고 있다. 소스영역에서의 평균

Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 증가하는 경향을 보여주고 있으며, 반면에 결정영역에서의 평균 Nusselt 수는 온도 Grashof 수(Gr_t)에 대하여, 감소하는 경향을 나타내고 있다. $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$ 의 범위에서 농도 Grashof 수(Gr_s)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 Sherwood 수를 나타내고 있다. 소스영역과 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 농도 Grashof 수(Gr_s)가 증가함에 따라, 감소하는 경향을 보이고 있다. 결정영역에서의 평균 Sherwood 수는 소스영역에서의 평균 Sherwood 수보다 약 4배 정도 크다. 또한, $3.28 \times 10^5 \leq Gr_s \leq 4.43 \times 10^5$ 의 범위에서 농도 Grashof 수(Gr_s)의 변화에 대하여, 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스 $\rho V(\text{g}/\text{cm}^2\text{sec})$ 를 나타내고 있다. 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스는 농도 Grashof 수(Gr_s)가 증가함에 따라, 지수적으로 감소하고 있다. 소스와 결정영역에서의 평균 물질플럭스는 거의 변화가 없으며, 같은 order 범위에 있다.

감사의 글

저자는 본 연구에 적용된 SIMPLER(Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equations Revised) program를 제공해준 한남대학교 화학공학과 김극태 교수에게 감사의 뜻을 표한다.

References

- [1] A.A. Kaplyanskii, V.V. Kulakov, Yu. F. Markov and Ć. Barta, "The soft mode properties in Raman spectra of improper ferroelastics Hg_2Cl_2 and Hg_2Br_2 ", *Solid State Commun.* 21 (1977) 1023.
- [2] M. Dalmon, S. Nakashima, S. Komatsubara and A. Mitsushishi, "Softening of acoustic and optical modes in ferroelstic phase in Hg_2Br_2 ", *Solid State Commun.* 28 (1978) 815.
- [3] N.B. Singh, M. Gottlieb, A.P. Goutzoulis, R.H. Hopkins and R. Mazelsky, "Mercurous Bromide acousto-optic devices", *J. Cryst. Growth* 89 (1988) 527.
- [4] N.B. Singh, M. Gottlieb, G.B. Branddt, A.M. Stewart, R.H. Hopkins, R. Mazelsky and M.E. Glicksman, "Growth and characterization of mercurous halide crystals: mercurous bromide system", *J. Cryst. Growth* 137 (1994) 155.
- [5] J.S. Kim, S.B. Trivedi, J. Soos, N. Gupta and W. Palosz, "Growth of Hg_2Cl_2 and Hg_2Br_2 single crystals by physical vapor transport", *J. Cryst. Growth* 310 (2008) 2457.
- [6] P.M. Amarasinghe, J.S. Kim, H. Chen, S. Trivedi, S.B. Qadri, J. Soo, M. Diestler, D. Zhang, N. Gupta and J.L. Jensen, "Growth of high quality mercurous halide sing crystals by physical vapor transport method for AOM and radiation detection applications", *J. Cryst. Growth* 450 (2016) 96.
- [7] T.H. Kim, H.T. Lee, Y.M. Kang, G.E. Jang, I.H. Kwon and B. Cho, "In-depth investigation of Hg_2Br_2 crystal growth and evolution", *Materials* 12 (2019) 4224.
- [8] O. Kwon, K. Kim, S.G. Woo, G.E. Jang and B. Cho, "Comparative analysis of Hg_2Br_2 and $Hg_2Br_xCl_{2-x}$ crystals grown via PVT", *Crystals* 10 (2020) 1096.
- [9] L. Liu, R. Li, L. Zhang, P. Zhang, G. Zhang, S. Xia and X. Tao, "Long wavelength infrared acousto-optic crystal Hg_2Br_2 : Growth optimization and photosensitivity investigation", *J. Alloys Compd.* 874 (2021) 159943.
- [10] P.M. Amarasinghe, J.S. Kim and S. Trivedi, "Mercurous Bromide (Hg_2Br_2) Acousto-Optic Tunable Filters (AOTFs) for the Long Wavelength Infrared (LWIR) Region", *J. Electron. Mater.* 50 (2021) 5774.
- [11] J.Q. Yang and B.X. Zhao, "Numerical investigation of double-diffusive convection in rectangular cavities with different aspect ratio I: High-accuracy numerical method", *Comput. Math. Appl.* 94 (2021) 155.
- [12] Q. Liu, X.B. Feng, X.T. Xu and Y.L. He, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for double-diffusive convection with Dufour and Soret effects", *Int. J. Heat Mass Transf.* 139 (2019) 713.
- [13] M. Chakkingal, R. Voigt, C.R. Kleijn and S. Kenjereš, "Effect of double-diffusive convection with cross gradients on heat and mass transfer in a cubical enclosure with adiabatic cylindrical obstacles", *Int. J. Heat Fluid Flow* 83 (2020) 108574.
- [14] G.A. Meften, "Conditional and unconditional stability for double diffusive convection when the viscosity has a maximum", *Appl. Math. Comput.* 392 (2021) 125694.
- [15] S. Hamimid, M. Guellal and M. Bouafia, "Limit the buoyancy ratio in Boussinesq approximation for double-diffusive convection in binary mixture", *Phys. Fluids* 33 (2021) 036101.
- [16] A. Chauhan, P.M. Sahu and C. Sasmal, "Effect of polymer additives and viscous dissipation on natural convection in a square cavity with differentially heated side walls", *Int. J. Heat and Mass Transf.* 175 (2021) 121342.
- [17] S.K. Kim, S.Y. Son, K.S. Song, J.-G. Choi and G.T. Kim, "Mercurous bromide (Hg_2Br_2) crystal growth by physical vapor transport and characterization", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 12 (2002) 272.
- [18] G.T. Kim, "Growth and characterization of lead bromide: application to mercurous bromide", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 14 (2004) 50.
- [19] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Lead bromide crystal growth from the melt and characterization: the effects of nonlinear thermal boundary conditions on convection during physical vapor crystal growth of mercurous bromide", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 13 (2004) 187.
- [20] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Effects of solutally dominant convection on physical vapor transport for a mixture of Hg_2Br_2 and Br_2 under microgravity environments", *Korean Chem. Eng. Res.* 52 (2014) 75.
- [21] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Numerical analysis of the influences of impurity on diffusive-convection flow fields by physical vapor transport under terrestrial and microgravity conditions: with application to mercurous chloride", *Appl. Chem. Eng.* 27 (2016) 335.
- [22] S.H. Ha and G.T. Kim, "Preliminary studies on double-diffusive natural convection during physical vapor transport crystal growth of Hg_2Br_2 for the spaceflight experiments", *Korean Chem. Eng. Res.* 57 (2019) 289.
- [23] G.T. Kim, "Study on simultaneous heat and mass transfer during the physical vapor transport of Hg_2Br_2 under μg conditions", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 29 (2019) 107.
- [24] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Double-diffusive convection affected by conductive and insulating side walls during physical vapor transport of Hg_2Br_2 ", *J. Korean Cryst. Growth Cryst. Tech.* 30 (2020) 117.
- [25] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Studies on Nusselt and Sherwood number for diffusion-advective convection during physical vapor transport of Hg_2Br_2 ", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 31 (2021) 127.
- [26] S.H. Ha and G.T. Kim, "Heat transfer study of double diffusive natural convection in a two-dimensional enclosure at different aspect ratios and thermal Grashof number during the physical vapor transport of mercurous bromide (Hg_2Br_2): Part I. Heat transfer", *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 32 (2002) 16.
- [27] G.T. Kim and M.H. Kwon, "Fundamental studies on

- thermosolutal convection in mercurous bromide (Hg_2Br_2) physical vapor transport processes”, *J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol.* 33 (2023) 110.
- [28] J.A. Weaver and R. Viskanta, “Natural convection due to horizontal temperature and concentration gradients -1. Variable thermophysical property effects”, *Int. J. Heat and Mass Transf.* 34 (1991) 3107.
- [29] S.V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, (Hemisphere Publishing Corp., Washington D. C., 1980) p. 131.
- [30] W.M.B. Duval, “Convective effects during the physical vapor transport process- I: Thermal convection”, *J. Mater. Processing Manu. Sci.* 1 (1992) 83.
- [31] W.M.B. Duval, “Convective effects during the physical vapor transport process- II: Thermosolutal convection” *J. Mater. Processing Manu. Sci.* 1 (1993) 295.
- [32] W.M.B. Duval, “Transition to chaos in the physical vapor transport process – I, proceeding of the ASME-WAM winter Annual Meeting, Symposium in fluid mechanics phenomena in microgravity”, ASME-WAM, New Orleans, Louisiana, Nov. 28 - Dec. 3, 1993.
- [33] W.M.B. Duval, N.B. Singh and M.E. Glicksman, “Physical vapor transport of mercurous chloride crystals: design of a microgravity experiment”, *J. Cryst. Growth* 174 (1997) 120.
- [34] W.M.B. Duval, H. Zhong and C. Batur, “Mixing driven by transient buoyancy flows. I. Kinematics”, *Phys. Fluids* 30 (2018) 054104.
- [35] W.M.B. Duval, H. Zhong and C. Batur, “Mixing driven by transient buoyancy flows. II. Flow dynamics”, *AIP Advances* 11 (2021) 085118.