

Study on self-diffusion transport phenomena during mercurous bromide (Hg_2Br_2) vapor processes

Nam Il Kim and Geug Tae Kim[†]

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

(Received February 15, 2024)

(Revised February 23, 2024)

(Accepted March 11, 2024)

Abstract During the Hg_2Br_2 physical vapor transport process with self-diffusion, it is concluded that for $10^{-3}g_0 \leq g \leq 1g_0$, the thermal buoyancy driven convection is dominant in the vapor phase; at the gravitational level of $g = 10^{-4}g_0$, the transition region from the convection to diffusion occurs; for $10^{-6}g_0 \leq g \leq 10^{-5}g_0$, the diffusion mode is predominant. The total molar flux of Hg_2Br_2 decays exponentially with the decreasing of one tenth of gravitational magnitude. For $10^\circ\text{C} \leq \Delta T \leq 50^\circ\text{C}$, the total molar flux increases linearly and directly with the temperature difference between the source and crystal regions.

Key words Mercurous bromide, Self-diffusion

브로민화수은(I)(Hg_2Br_2) 증착공정에서 자체 확산 연구

김남일, 김극태[†]

한남대학교 화학공학과, 대전, 34054

(2024년 2월 15일 접수)

(2024년 2월 23일 심사완료)

(2024년 3월 11일 게재확정)

요약 브로민화수은(I)(Hg_2Br_2) 자체 확산 물리적 증착법 공정에서 자체 확산 전달현상 연구에서 얻어진 결론은 $10^{-3}g_0 \leq g \leq 1g_0$ 영역에서는 열 대류현상이 지배적이며, $g = 10^{-4}g_0$ 영역에서는 대류에서 확산영역으로 전이되는 영역이며, $10^{-6}g_0 \leq g \leq 10^{-5}g_0$ 영역에서는 확산모드가 지배적이다. Hg_2Br_2 의 총 몰플럭스는 중력가속도의 레벨(level)이 1/10 크기로 감소함에 따라 기하급수적으로 감소함을 나타내고 있다는 것이다. $10^\circ\text{C} \leq \Delta T \leq 50^\circ\text{C}$ 의 온도차 범위에서는 온도차(ΔT)와 Hg_2Br_2 의 총 몰플럭스에 대한 관계식은 선형적으로 직선적 비례관계성을 보여주고 있다.

1. 서론

최근 40년 동안 브로민화수은(I)(Hg_2Br_2) 단결정은 X-ray detector 같은 음향광학 및 광전자 장치에 적용하기 알맞은 $0.36\sim 20\ \mu\text{m}$ 의 특별한 광학적 넓은 전송 범위를 가지고 있기 때문에 중요한 음향 광학 전자 소재로 알려져 왔다[1-4]. 일반적으로, 브로민화수은(I)(Hg_2Br_2) 단결정은 밀폐된 실리카 유리 앰플에서 물리적 증착법을 이용하여 결정 성장시킨다. 물리적 증착법의 기본 원리는 밀폐된 용기내에서 승화(sublimation)와 응축(condensation)이다. 다시 말하면, 밀폐된 실리

카 유리 용기내에서, 소스(source) 재료와 결정(crystal) 재료 사이에 형성되는 온도 구배하에서의 증기상(vapor phase)의 증기 성분이 화학 반응없이 증기상에서 증기가 전달되는 승화와 응축 과정이다. 따라서, 브로민화수은(I)의 물리적 증착법 공정에서는 기체상에서의 증기 성분 Hg_2Br_2 이 Hg_2Br_2 소스 물질에서 기체상으로 승화가 이루어진 후에, Hg_2Br_2 결정상 영역으로 전달되어 재결합(recrystallization)된다.

현재 물리적 증착법 공정의 산업적 응용은 매우 제한적인 주된 이유는 증기 상에서 발생하는 전달현상(transport phenomena)이 복잡하고 난해하여 증기상에서 공정을 정확하게 디자인하는 것이 어렵기 때문이다. 이러한 복잡함은 지상에서 반드시 일어나는 중력의 영향과 물리적 증착법의 추진력인 온도차로 인하여 발생하는 열 대류

[†]Corresponding author

E-mail: geugtaekim@gmail.com

현상 때문이다. 일반적으로 대류는 결정성장의 속도면에서는 장점이지만, 단결정의 품질면에서 품질에 나쁜 영향을 미친다. 따라서, 물리적 증착법에서는 가능한 대류의 영향을 최소화하는 것이 필요하지만, 이것이 쉬운 문제는 아니다. 최근 약 20년 동안 저자들은 브로민화 수은(I)(Hg₂Br₂) 단결정에서 일어나는 전달현상을 체계적으로 대류현상 매개변수에 대하여 연구를 진행해왔다[6-14]. 본 연구에서는 이러한 기본적인 대류현상 연구를 통하여, 대류가 결정성장의 속도에 미치는 영향을 확산율속 단계(diffusion-limited step)과 Stefan 확산모델에 기초하여, 비압축성 유체 흐름과 열전달 문제의 2차원 수치적 모사(numerical simulations)를 위해 SIMPLER (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised) algorithm[15]을 사용하였다. 본 연구에서는 연구의 범위는 온도차와 우주환경에서의 미소중력의 영향에 대하여 연구 조사한다. 종래의 연구[6-14]와 차별성은 브로민화 수은(I)(Hg₂Br₂)의 자체 확산 전달현상 연구에 기초한 미소 중력환경 조건에 있다.

2. 물리적 및 수학적 모델

Figure 1은 소스와 결정면 사이에서 증기상에서의 전달현상이 일어나는 길이 L , 높이 H 이고, 애스펙트 비율 (aspect ratio, L/H) = 1인 정사각형 밀폐공간에서, Hg₂Br₂ 성분의 전달현상이 일어나는 영역을 간단하게 도식화한 것을 나타낸다. 소스 영역에서는 높은 온도 T_s 에서 유지되며, 결정 영역에서는 낮은 온도 T_c 에서 유지되고 있다. 즉, $T_s > T_c$ 이다. 밀도를 제외하고는 Hg₂Br₂ 성분의 물리 화학적 물성치는 일정하다고 가정한다. Hg₂Br₂ 성분의 밀도는 이상기체(ideal gas)의 법칙으로부터 구하며, Hg₂Br₂ 성분의 증기 분압은 달톤(Dalton) 분압의 법칙으로부터 구한다. 2차원 정사각형 밀폐공간 물리적 증착법 결정 성장 용기내 Hg₂Br₂ 증기 성분의 전달현상은 질량, 운동량, 에너지 및 물질전달, 그리고 이에 상응하는 경계

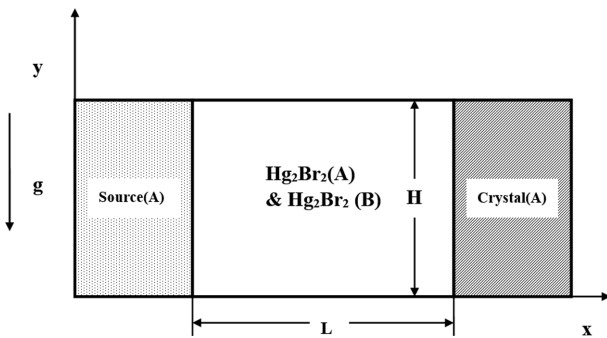


Fig. 1. Schematics of the problem analyzed: Hg₂Br₂(A)-Hg₂Br₂(B) PVT growth closed ampoule.

조건에 의하여 표현된다. v_x, v_y 는 x, y 직교좌표에서 x 및 y 좌표에 해당하는 속도성분을 나타내고 T, ω_A, p 는 각각 온도, 성분 A(Hg₂Br₂)의 질량 분율 및 압력을 나타낸다. 무차원 변수는 식(1)~(3)에서 정의되며, 무차원 지배방정식은 식(4)~(7)로, 경계조건은 식(8)~(10)으로 표현된다.

$$x^* = \frac{x}{H}, y^* = \frac{y}{H}, \quad (1)$$

$$u = \frac{u_x}{U_c}, v = \frac{v_y}{U_c}, p = \frac{p}{\rho_c U_c^2}, \quad (2)$$

$$T^* = \frac{T - T_c}{T_s - T_c}, \omega_A^* = \frac{\omega_A - \omega_{A,c}}{\omega_{A,s} - \omega_{A,c}}. \quad (3)$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{V}^* = 0, \quad (4)$$

$$\vec{\nabla}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* = -\nabla^* p^* + \text{Pr} \nabla^{*2} \vec{V}^* - \text{Ra} \cdot \text{Pr} \cdot T^* \cdot \mathbf{e}_g, \quad (5)$$

$$\vec{\nabla}^* \cdot \nabla^* T^* = \nabla^{*2} T^* \quad (6)$$

$$\vec{\nabla}^* \cdot \nabla^* \omega_A^* = \frac{1}{\text{Le}} \nabla^{*2} \omega_A^* \quad (7)$$

용기벽면 ($0 < x^* < L/H, y^* = 0$ & 1):

$$u(x^*, 0) = u(x^*, 1) = v(x^*, 0) = v(x^*, 1) = 0 \quad (8)$$

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

$$T^*(x^*, 0) = T^*(x^*, 1) = \frac{T_s - T_c}{T_s - T_c}$$

소스영역 ($x^* = 0, 0 < y^* < 1$):

$$u(0, y^*) = -\frac{1}{\text{Le}(1 - \omega_{A,s})} \frac{\partial \omega_A^*(0, y^*)}{\partial x^*}, \quad (9)$$

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

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

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

결정영역 ($x^* = L/H, 0 < y^* < 1$):

$$u(L/H, y^*) = -\frac{1}{\text{Le}(1 - \omega_{A,c})} \frac{\partial \omega_A^*(L/H, y^*)}{\partial x^*} \quad (10)$$

$$v(L/H, y^*) = 0,$$

$$T^*(L/H, y^*) = 0,$$

$$\omega_A^*(L/H, y^*) = 0.$$

3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 $M_A = M_B$ 이기 때문에 농도차에 의한 대류의 영향을 무시하고, 오로지 온도차에 의한 열 대류

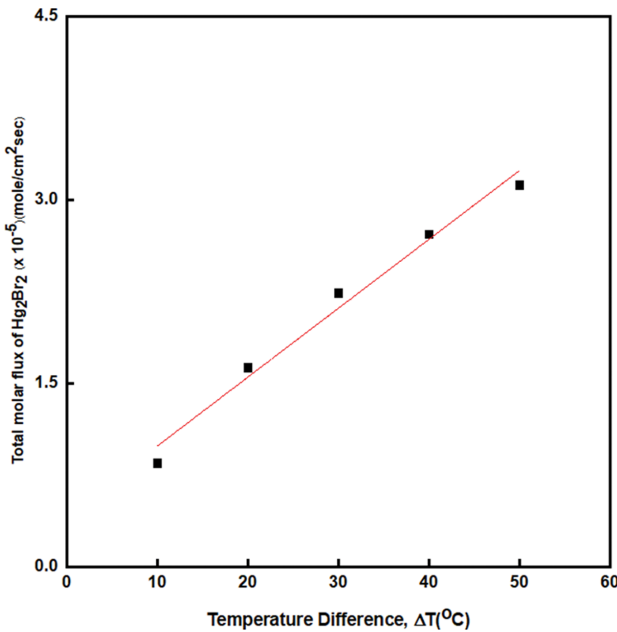


Fig. 2. The effects of the temperature difference between the source and the crystal on the total molar flux of Hg_2Br_2 for aspect ratio $(L/H) = 1$ and the linear conducting walls.

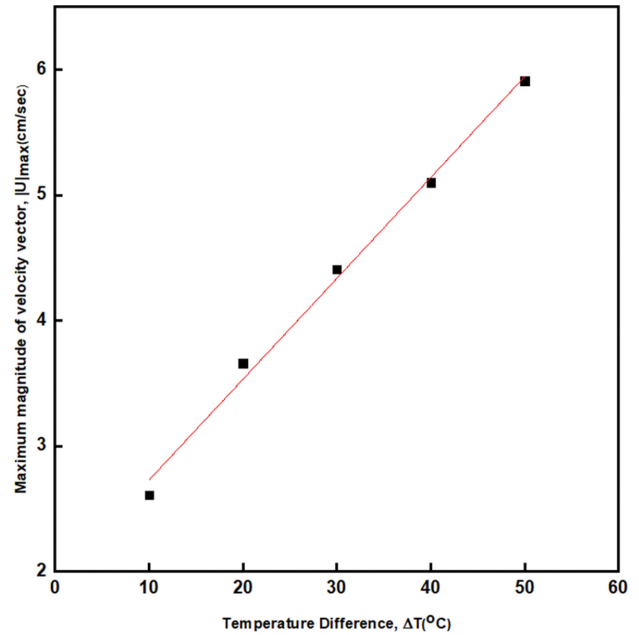


Fig. 3. The maximum magnitude of velocity vector, $|U|_{max}$ as the temperature difference between the source and the crystal for $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$, corresponding to Fig. 2.

현상에 미치는 영향을 규명하는 것이다. 온도구배를 선형 전도성 온도조건을 고려한다. 소스온도 $T_s = 340^\circ C$ 를 고정시키고, 온도차는 결정 영역에서 낮은 온도 유지하며, 온도차 $10^\circ C$ 에서 $50^\circ C$ 까지 범위를 확대하여 수치적 모사를 실행하였다. 따라서, 본 연구에서는 농도차에 의한 농도 대류에 의한 영향을 전혀 고려되지 않고, 순수한 열 대류현상만이 고려된다.

Figure 2는 지상 중력조건에서, $g = 1g_0$, 물리적 증착법에 의한 결정성장의 추진력인 온도차(ΔT), 즉 소스영역과 단결정영역의 온도차가 Hg_2Br_2 의 총 몰플럭스(total molar flux)에 미치는 영향을 설명하고 있다. $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$ 의 온도차 범위에서는 온도차(ΔT)와 Hg_2Br_2 의 총 몰플럭스에 대한 관계식은 선형적으로 직선적 비례관계성을 보여주고 있다. 즉, 온도차(ΔT)가 증가함에 따라, 총 몰플럭스는 일정한 기울기를 가지고 증가한다. 고려되

는 공정조건은 온도차 범위 $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$, 애스펙트 비율(aspect ratio, L/H) = 1, 선형 전도성 앰플의 벽면 온도조건, 동점도계수(kinematic viscosity) = $0.031 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, 열확산계수(thermal diffusivity) = $0.035 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, 이성분계의 확산계수(binary diffusivity) = $0.042 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, 총 운전압력(total operating pressure) = 526 Torr이다. Table 1에서 $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$ 의 온도차 범위에서는 Hg_2Br_2 의 총 몰 플럭스와 속도벡터의 최대치 $|U|_{max}(\text{cm/sec})$ 를 수록하였다. $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$ 의 온도차 범위에서는, 온도차(ΔT)에 대한 총 몰플럭스의 기울기는 $0.05675 \text{ mole cm}^{-2} \text{ sec}^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$ 이다.

Figure 3은 Fig. 2에 상응하는 $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$ 의 온도차(ΔT) 범위에서, 속도벡터의 최대치 $|U|_{max}(\text{cm/sec})$ 와 온도차(ΔT)의 선형적 비례 관계성을 나타내고 있다. 여기서, 정사각형 밀폐공간에서 중형비는 전달길이(L)/폭

Table 1

Total molar flux and Maximum magnitude of velocity vector, $|U|_{max}$ (cmsec^{-1}) for $10^\circ C \leq \Delta T \leq 50^\circ C$ with aspect ratio $(L/H) = 1$ and the linear conducting walls, based on kinematic viscosity = $0.031 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, thermal diffusivity = $0.035 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, binary diffusivity = $0.042 \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, total operating pressure = 526 Torr

Case	T_s	T_c	Total molar flux (mole $\text{cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) ($\times 10^{-5}$)	Maximum magnitude of velocity vector, $ U _{max}$ (cmsec^{-1})
C1	$340^\circ C$	$330^\circ C$	0.85	2.61
C2	$340^\circ C$	$320^\circ C$	1.63	3.66
C3	$340^\circ C$	$310^\circ C$	2.24	4.41
C4	$340^\circ C$	$300^\circ C$	2.72	5.10
C5	$340^\circ C$	$290^\circ C$	3.12	5.91

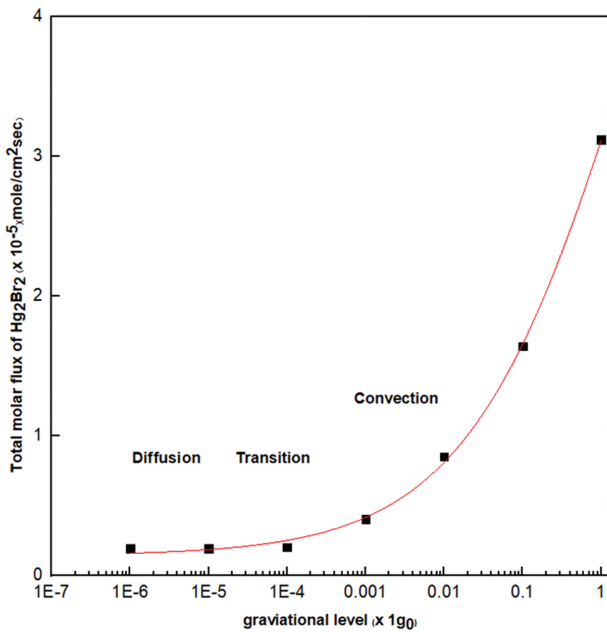


Fig. 4. The effects of the gravitational level on the total molar flux of Hg₂Br₂ for aspect ratio (L/H) = 1 and the linear conducting walls, $10^{-6}g_0 \leq g \leq 1g_0$.

(H)을 의미하며, L = 5 cm, H = 5 cm로 종횡비는 1이다. 용기 벽면에서의 온도분포의 경계조건은 전도성 선형온도조건으로 한다. 선형 비례정도를 나타내는 온도차에 대한 차원의 속도벡터의 최대치 $|U|_{\max}$ (cm/sec)의 기울기는 $0.0825 \text{ cmsec}^{-1}\text{C}^{-1}$ 이다. Figure 3과 Table 1에서 보는 바와 같이, $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ (Case C1)의 경우는 온도를 4배 증가시켰을 때, 즉 300% 상승하였을 때, $\Delta T = 50^\circ\text{C}$ (Case C4)의 경우에 해당하는 것으로, 속도벡터의 최대치 $|U|_{\max}$ 는 2.61 cm/sec에서 5.10 cm/sec로 거의 2배 증가한다. 이는 물리적 승화법의 추진력인 온도차의 증가에 따른 열 대류현상의 크기를 그대로 반영하는 것이다.

Figure 4는 애스펙트 비율(aspect ratio, L/H) = 1, 전도

성 선형온도조건하에서, $10^{-6}g_0 \leq g \leq 1g_0$ 범위에서, 중력 가속도의 레벨(level)이 Hg₂Br₂의 총 몰플럭스(total molar flux)에 미치는 영향을 나타내고 있다. Table 2는 총 몰플럭스(total molar flux), 속도벡터의 최대치 $|U|_{\max}$ 를 나타내고 있으며, C5 in Table 1의 경우에 기초한 것이다. $10^{-3}g_0 \leq g \leq 1g_0$ 영역에서는 열 대류현상이 지배적임을 Fig. 5와 Fig. 6을 통해서 알 수 있다. Table 2에서, Case G04에 해당하는 $g = 10^{-4}g_0$ 영역에서는 대류에서 확산영역으로 전이되는 영역으로 보인다. $10^{-6}g_0 \leq g \leq 10^{-5}g_0$ 영역에서는 확산모드가 지배적임을 Fig. 4와 Fig. 7, Table 2을 비교분석을 통하여 알 수 있다. Table 2에서, $10^{-6}g_0 \leq g \leq 10^{-5}g_0$ 영역에서의 확산모드에서는 Hg₂Br₂의 총 몰플럭스(total molar flux)와 속도벡터의 최대치 $|U|_{\max}$ 의 변화가 없음을 나타내고 있다. Figure 4에서 나타난 것처럼, 총 몰플럭스는 중력가속도의 레벨(level)이 10의 order 감소함에 따라 기하급수적으로 감소함을 나타내고 있다.

Figures 5~7는 C5 in Table 1에서의 공정 조건하에서, 각각 $g = 1g_0$, $g = 10^{-4}g_0$, $g = 10^{-5}g_0$ 에 해당하는 속도벡터, 유선, 온도, 질량농도 분포를 나타내고 있다. C5 in Table 1에서의 공정 조건은 $P_b = 200 \text{ Torr}$, aspect ratio = 1, $\Delta T = 50^\circ\text{C}$, 총 운전압력(total operating pressure) = 526 Torr, $g = 1g_0$, total molar flux of Hg₂Br₂ = $3.12 \times 10^{-5} \text{ mole cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$, $|U|_{\max} = 5.91 \text{ cm/sec}$ 이다. 동점도계수(kinematic viscosity) = $0.031 \text{ cm}^2\text{sec}^{-1}$, 열확산계수(thermal diffusivity) = $0.035 \text{ cm}^2\text{sec}^{-1}$, 이성분계의 확산계수(binary diffusivity) = $0.042 \text{ cm}^2\text{sec}^{-1}$ 에 해당하는 무차원 Prandtl 수 = 0.9, 무차원 Schmidt 수 = 0.75, 무차원 Peclet 수 = 0.82, 무차원 열 Grashof 수 = 9.78×10^5 ($g = 1g_0$ 의 경우). Figure 5에서는 대류현상의 속도분포와 유선형이 벽면을 따라 형성된, 경계층 중심의 boundary layer flow를 주로 이루고 있으며, Fig. 6에서는 대류현상의 속도분포와 유선형이 가운데 1개의 cell을 만들고 있는 중심 흐름을 주로 이루고 있다. Figure 5와 Fig. 6에서는 대류 중심

Table 2

Total molar flux and Maximum magnitude of velocity vector, $|U|_{\max}$ (cmsec⁻¹) for various gravity accelerations $10^{-6}g_0 \leq g \leq 1g_0$ with aspect ratio (L/H) = 1 and the linear conducting walls: based on case C5 in Table 1

Case	Gravity acceleration ($g_0 = 9.8 \text{ msec}^{-2}$)	Total molar flux (mole cm ⁻² sec ⁻¹) ($\times 10^{-5}$)	Maximum magnitude of velocity vector, $ U _{\max}$ (cmsec ⁻¹)	Region
G1	$1g_0$	3.12	5.91	Convection
G01	$10^{-1}g_0$	1.64	1.93	Convection
G02	$10^{-2}g_0$	0.85	0.6	Convection
G03	$10^{-3}g_0$	0.40	0.16	Convection
G04	$10^{-4}g_0$	0.20	0.027	Transition from convection to diffusion
G05	$10^{-5}g_0$	0.19	0.01	Diffusion
G06	$10^{-6}g_0$	0.19	0.0095	Diffusion

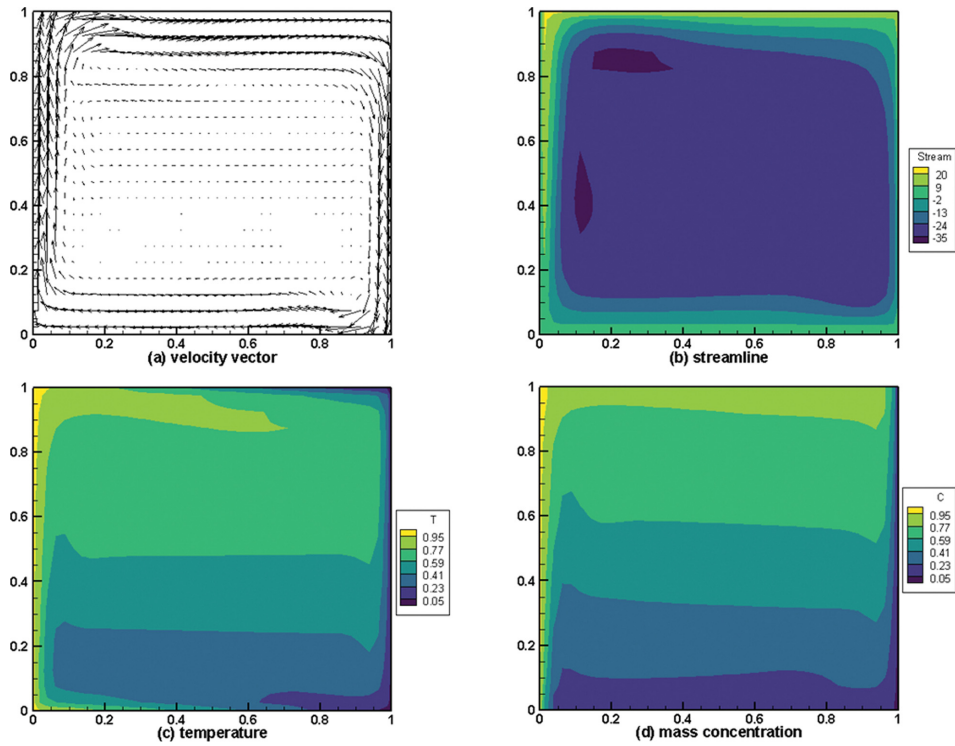


Fig. 5. (a) Velocity vector, (b) streamline, (c) temperature, (d) mass concentration profile for the case of $P_B = 200$ Torr, aspect ratio = 1. Maximum magnitude of velocity vector = 0.1948×10^4 , maximum streamline = 0.968×10^4 , minimum streamline = 0.0. Prandtl number = 9.0, $\Delta T = 50^\circ\text{C}$, Peclet number = 0.82, thermal Grashof number = 9.78×10^6 . The total molar flux of $\text{Hg}_2\text{Br}_2 = 3.12 \times 10^{-5}$ mole $\text{cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$, $|U|_{\text{max}} = 5.91$ cm/sec, based on case of C5 in Table 1, kinematic viscosity = 0.031 $\text{cm}^2\text{sec}^{-1}$, thermal diffusivity = 0.035 $\text{cm}^2\text{sec}^{-1}$, binary diffusivity = 0.042 $\text{cm}^2\text{sec}^{-1}$, total operating pressure = 526 Torr.

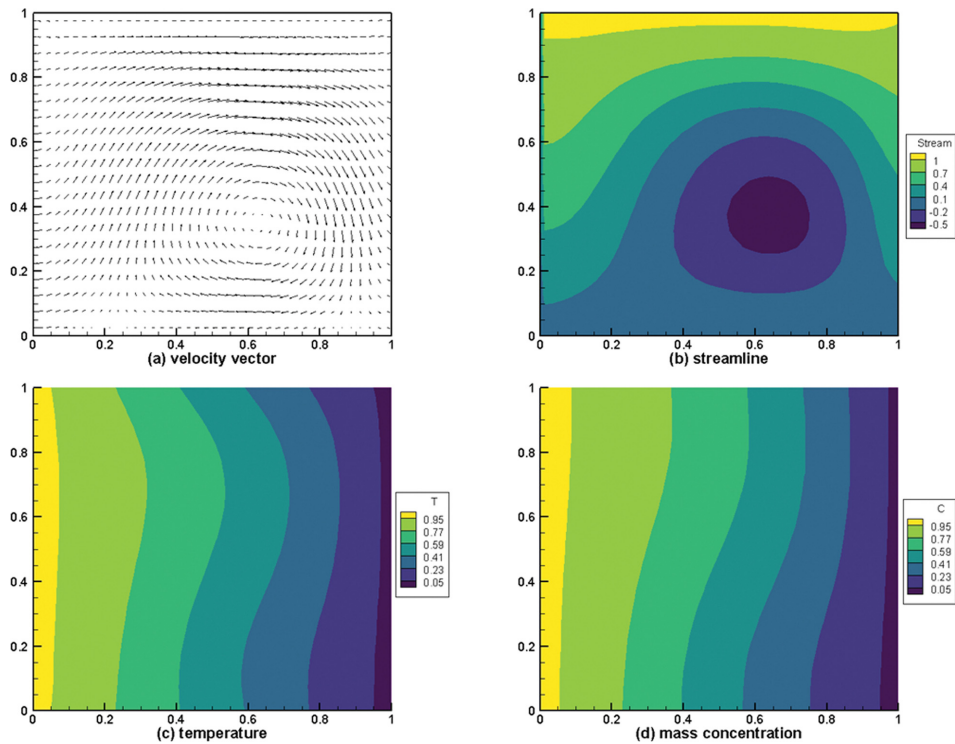


Fig. 6. (a) Velocity vector, (b) streamline, (c) temperature, (d) mass concentration profile for the case of $P_B = 200$ Torr, aspect ratio = 1. Total molar flux of $\text{Hg}_2\text{Br}_2 = 0.2 \times 10^{-5}$ mole $\text{cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$, $|U|_{\text{max}} = 0.027$ cm/sec, based on case of C5 in Table 1, corresponding to case of G04 in Table 2: $g = 10^{-4}g_0$.

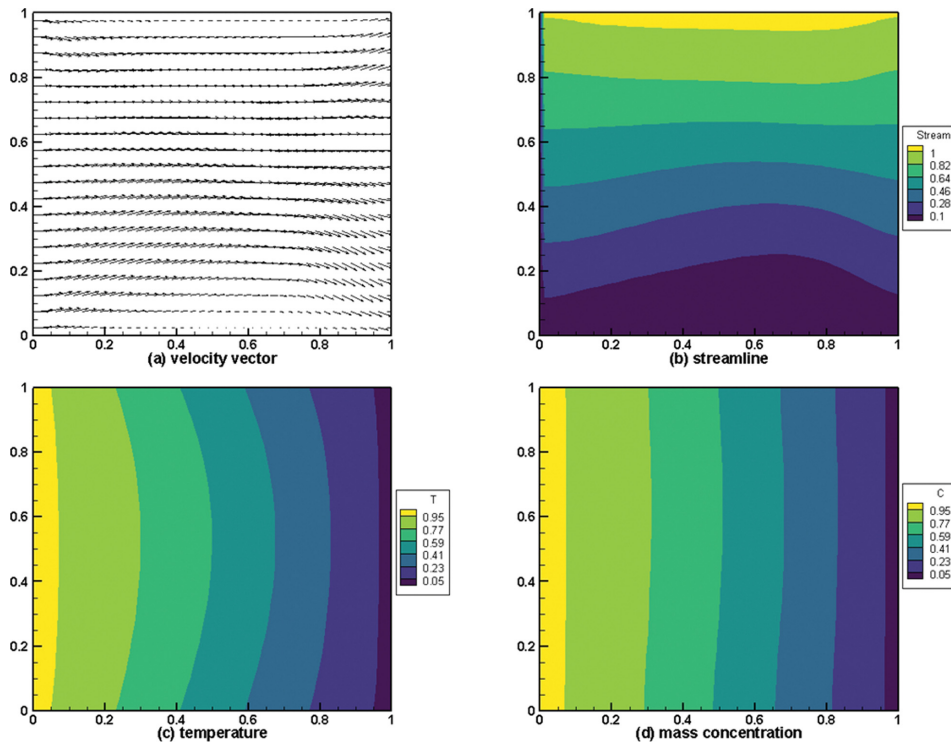


Fig. 7. (a) Velocity vector, (b) streamline, (c) temperature, (d) mass concentration profile for the case of $P_B = 200$ Torr, aspect ratio = 1. Total molar flux of $\text{Hg}_2\text{Br}_2 = 0.19 \times 10^{-5}$ mole $\text{cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$, $|U|_{\max} = 0.01$ cm/sec, based on case of C5 in Table 1, corresponding to case of G05 in Table 2: $g = 10^{-5}g_0$.

의 유동 흐름을 보여주고 있다. 그에 반하여, Fig. 7은 미소 중력영역인, $g = 10^{-5}g_0$ 에서는 확산 형태의 물질전달 현상을 보여주고 있다. Figures 5~6에서는 대류현상의 흐름이 x, y 직교 중심축에 대하여, 비대칭(asymmetrical) 유동흐름을 나타내고 있으므로, 3차원의 유동의 흐름을 설명한다.

4. 결 론

자체 확산 전달현상 연구에서 얻어진 결론은 $10^{-3}g_0 \leq g \leq 1g_0$ 영역에서는 열 대류현상이 지배적이며, $g = 10^{-4}g_0$ 영역에서는 대류에서 확산영역으로 전이되는 영역이며, $10^{-6}g_0 \leq g \leq 10^{-5}g_0$ 영역에서는 확산모드가 지배적이다. Hg_2Br_2 의 총 몰플럭스는 중력가속도의 레벨(level)이 10의 order 감소함에 따라 기하급수적으로 감소함을 나타내고 있다는 것이다.

감사의 글

본 연구는 2023년도 한남대학교 학술연구비(과제번호: 2023A107)의 지원을 받아 수행되었습니다.

References

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] O. Kwon, K. Kim, S.-G. Woo, G.-E. Jang and B. Cho, "Comparative analysis of Hg_2Br_2 and $\text{Hg}_2\text{Br}_x\text{Cl}_{2-x}$ Crystals Grown via PVT", Crystals 10 (2020) 1096.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] G.T. Kim, "Growth and characterization of lead bromide: application to mercurous bromide", J. Korean Cryst. Growth and Cryst. Technol. 14 (2004) 50.

- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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 and Cryst. Technol.* 30 (2020) 117.
- [12] 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) 1.
- [13] 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 (2022) 16.
- [14] 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.
- [15] S.V. Patankar, "Numerical heat transfer and fluid flow", (Hemisphere Publishing Corp., Washington D.C., 1980).