

# Studies on correlations of crystal growth and Nusselt/Sherwood number during physical vapor transport of $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$

Geug Tae Kim<sup>†</sup> and Jung Kyu Park<sup>\*</sup>

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

*\*Korea Institute of Geoscience and Mineral Resources, Daejeon 34132, Republic of Korea*

(Received November 3, 2025)

(Revised November 5, 2025)

(Accepted November 5, 2025)

**Abstract** This paper presents a numerical simulation of double diffusive convection in a rectangular enclosure during physical vapor transport of  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ . The flow characteristics are numerically investigated as a function of the partial pressure of  $\text{Br}_2$  at 10 Torr and 200 Torr at a temperature difference of  $10^\circ\text{C}$  ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ ) between the source and crystal regions, and the velocity vectors, streamlines, isotherms, and isomass concentration contours are presented. In addition, both the average Nusselt number and the average Sherwood number decrease linearly and exponentially, respectively, with increasing a partial pressure of  $\text{Br}_2$ . For pressures of  $\text{Br}_2$  for 10 Torr and 200 Torr, the average Nusselt number in the crystal region is larger than in the source region, and conversely, the average Sherwood number in the crystal region is three times larger than in the source region.

**Key words** Nusselt number, Sherwood number, Physical vapor transport,  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$

## 염화수은(II)( $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ ) 물리적 승화공정에서 결정성장과 Nusselt/Sherwood 수의 상관관계에 대한 연구

김극태<sup>†</sup>, 박정규<sup>\*</sup>

한남대학교 대덕밸리캠퍼스 공과대학 화학공학과, 대전, 34054

\*한국지질자원연구원 지질자원융합지식본부, 대전, 34132

(2025년 11월 3일 접수)

(2025년 11월 5일 심사완료)

(2025년 11월 5일 게재확정)

**요약** 본 논문은  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ 의 물리적 증기 수송(physical vapor transport) 동안 사각 용기내에서 이중확산대류에 대한 수치 시뮬레이션에 관한 것이다. 소스 영역과 결정 영역 사이의 온도 차이  $10^\circ\text{C}$ ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ )에서 10 Torr와 200 Torr의  $\text{Br}_2$  성분의 분압에 따른 유동 특성을 조사하고 속도 벡터와 유선, 등온선, 그리고 등질량 농도 등고선으로 제시한다. 또한, 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수는 모두  $\text{Br}_2$  성분의 분압이 증가함에 따라 선형적으로, 그리고 지수함수적으로 각각 감소하는 것으로 나타났다.  $\text{Br}_2$  성분의 분압의 10 Torr와 200 Torr에 대해 결정 영역에서 평균 Nusselt 수가 결정 영역에서 보다 크고, 반대로 결정 영역에서 평균 Sherwood 수가 소스 영역보다 3배 더 큰 것으로 나타났다.

### 1. 서론

이중확산대류(double diffusion convection)는 중력과 온도 및 용질 구배(gradient)에 의한 밀도 변화의 결과로 나타나는 부력 구동 운동과 관련된 전달 현상으로, 온도-용질 대류 또는 결합된 자연 대류에 의한 열 및 물질

전달이다. 고체의 승화 또는 액체의 증발(성분 A)로 인해 고온 측벽에서 용기 내로의 질량 유동이 발생하고, 반대쪽 저온 측벽에서 성분 A의 응축이 발생할 때, 용기내에서 온도 및 용질 구배(gradient)에 의한 자연 대류와 표면에서의 질량 유동이 동시에 발생하며, 이러한 전달현상을 이중확산대류(double diffusion convection)이라고 한다. 용기 내에는 성분 A(고체 또는 액체)와 불순물 기체인, 성분 (B)가 존재한다. 전형적인 예로, 증기(vapor)

<sup>†</sup>Corresponding author  
E-mail: geugtaekim@gmail.com

결정 성장 시스템에서 물리적 증기 수송(physical vapor transport)에 의한 전달 현상은 이중화산대류에 해당된다. Duval[1]은 물리적 증기 수송(physical vapor transport)을 통해 성장된 수은 할로겐화물( $Hg_2X_2$ ,  $X = Br, Cl$ )의 증기 결정에서 이중화산대류의 수치 시뮬레이션을 수행했습니다. Weaver와 Viskanta[2,3]는 응용 관점에서 증발과 응축을 기반으로 이중화산대류의 체계적인 2차원 수치 시뮬레이션을 수행했다.

할로겐화물( $Hg_2X_2$ ,  $X = Br, Cl$ ) 물질은 음향 광학 물질 및 신호 처리 광학(예: Bragg cell) 응용 분야에서 가장 유명한 물질로 잘 알려져 있다[4-6]. 특히 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ ) 결정은 분광 이미징 및 광학 처리 분야에서 뛰어난 음향 광학적 특성으로 인해 많은 주목을 받고 있다. Singh과 그의 연구팀[[7-9]은 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ )의 대형 단결정의 성장, 특성 분석 및 개발을 체계적으로 연구했다. 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ )에 대한 최신 보고서는 참고문헌[10,11]에서 찾을 수 있다. Liu 등[12]은 고품질 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ ) 결정의 성장이 결정 특성 분석 및 음향 광학 소자 제작에 중요하다고 발표했다. 그들은 물리적 증기 수송법을 사용하여 직경 35 mm, 길이 40 mm의 고품질 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ ) 결정을 성공적으로 제조했다. 본 연구는 Kim의 연구진[13]에 발표된 내용 이후의 시스템적 체계적 파라미터의 연구이다. Kim의 연구진의 결과[13]는 브롬화(I)수은과 아르곤 불활성가스와, 선형적 온도 경계조건에 관한 것이다.

본 연구에서 수치 시뮬레이션은 이중화산 자연대류에서 온도 및 물질 전달 현상이 벽면이 단열된 온도조건하에서 용기내 물리적 증기 수송(physical vapor transport)에 의한  $Hg_2Cl_2$  증기 성장의 대류현상에서 무차원 Nusselt 수(Nu)와 Sherwood 수(Sh)에 어떻게 영향을 미치는지를 정량적으로 규명하고자 한다. 유선형(streamline), 등온선(iso-temperature), 등질량 농도(iso-mass concentration) 등고선을 이용한 유동 특성을 제시한다. 마지막으로, 응용 관점에서, 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수와 성분 B( $Br_2$ )의 분압( $P_B$ ) 간의 간단한 상관관계를 제시한다.

## 2. 수학적 모델링

Figure 1과 엑스펙트 비율(aspect ratio, length/width)이 1인 정사각형 공동에서 물리적 증기 수송(physical vapor transport)결정 성장을 고려한다. 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ )(성분 A)의 승화는 온도  $T_s$ 의 고온 끝벽(소스 영역)에서 발생하고,  $Hg_2Cl_2$ (성분 A)의 증기는 증기 영역으로 이동하며, 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ )(성분 A)의 증기 응축은 온도  $T_c$ 의 반대편 저온 끝벽(결정 영역)에서 발생한다( $T_s > T_c$ ). 염화수소(I)( $Hg_2Cl_2$ )(성분 A)과 불순물인 브롬기체,  $Br_2$

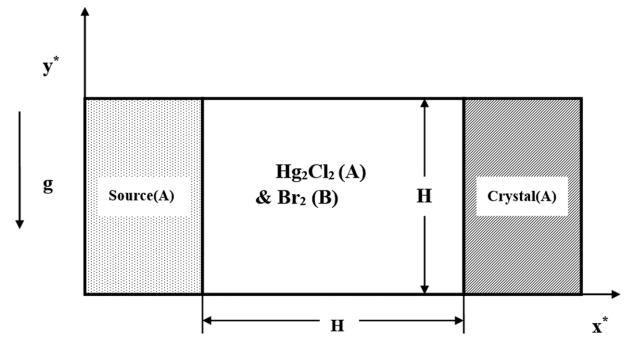


Fig. 1. System schematic and coordinates for numerical simulation of PVT crystal growth square cavity of  $Hg_2Cl_2(A)-Br_2(B)$ .

(성분 B)이 용기 내의 증기 영역에 존재한다. 따라서 이중화산대류는 물리적 증기 수송(physical vapor transport) 성장 용기내의 열 및 농도구배(gradient)에 의한 부력에 의한 온도 및 농도 전달현상이다. 본 연구에서는 화학 반응, 열 생성 또는 열 발산이 없으며, 정상 상태의 시스템을 고려한다. 용기내에서의 전달현상의 흐름은 층류로 가정되고, 용기내의 내의 복사열전달은 무시한다.

### 2.1. 무차원 형태의 방정식

열-물리적 특성(밀도  $\rho$ , 동점도  $\nu$ , 열전도도  $k$ , 열 확산율  $\alpha$  및 질량 확산율  $D_{AB}$ )은 각각 by  $\rho_0, \nu_0, k_0, \alpha_0, D_{AB,0}$ 으로 스케일(scale)된다. 여기서 아래 첨자 0은 기준 온도  $T_0$  및 기준 질량 분율  $\omega_0$ 에서의 값을 나타냅니다. 본 연구에서는  $T_0 = (T_h + T_c)/2$ ,  $\omega_0 = (\omega_{A,s} + \omega_{A,c})/2$ 를 사용한다.

무차원 양:

$$x^* = x/H, y^* = y/H, u = v_x/U, v = v_y/U,$$

$$p^* = p/\rho_0 U^2, T^* = (T - T_c)/(T_h - T_c),$$

$$\omega_A^* = (\omega_A - \omega_{A,c})/(\omega_{A,s} - \omega_{A,c}), U = \alpha/H,$$

여기서  $U$ 는 특성 속도이고  $H$ 는 공동 높이이며,  $x, y$ 는 각각 공동의 길이와 높이를 따라 지시되는 직각 좌표이고,  $p$ 는 압력이다.

질량, 운동량, 에너지 및 물질농도의 보존 방정식은 다음과 같이 무차원 형태로 주어진다.

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

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

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

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

해당 무차원 경계 조건은 다음과 같다.

벽면( $0 < x^* < 1, y^* = 0$ 과  $1$ ):

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

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

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

소스( $x^* = 0, 0 < y^* < 1$ ):

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

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

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

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

결정( $x^* = 1, 0 < y^* < 1$ ):

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

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

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

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

지배 방정식에서 Prandtl 수, Lewis 수, Peclet 수, concentration 수, 열 Grashof 수, 용질 Grashof 수의 여섯 가지 무차원 매개 변수가 나타난다. 용기내 이중확산 대류의 열 및 물질 전달은 다음과 같이 정의되는 국소 (local) Nusselt 수,  $Nu_y$ , Sherwood 수  $Sh_y$ 로 나타낸다:

$$Nu_y = hH/k,$$

$$Sh_y = h_m H / r_{D_{AB}}$$

여기서,  $h$ 와  $h_m$ 은 각각 열전달 대류 계수와 물질 전달 대류 계수이다.

평균대류 Nusselt, Sherwood 수는 높이 벽에 대한 온도 및 질량 농도 기울기를 통합하여 계산된다.

$$Nu = - \int Nu_y (y^*) dy^*,$$

$$Sh = - \int Sh_y (y^*) dy^*$$

Nusselt 수는 열전도만으로 인한 열유속을 포함한 전체 열유속이다. 즉, 무차원 확산-대류 에너지 유속은 다음과 같이 표시된다.

$$Q_d = - (\partial T^* / \partial x^*)|_{T^*=0}$$

$Q_d$ 는 이중 확산 대류로 인해 벽에서 열전달이 증가함을 보여준다. 벽에 질량 플럭스가 있을 때, 에너지는 유

체의 이류(advection)에 의해 표면에서 용기내부로 전달된다. 따라서 용기벽면에서 전달되는 총 에너지에는 확산과 이류의 기여가 포함된다. 따라서 Nusselt 수는 다음과 같이 정의된다.

$$Nu_y = - (\partial T^* / \partial x^*)|_{T^*=0} + \rho^* u T^*,$$

$$\text{or } Nu = (Q_d + Q_a)$$

여기서  $Q_a = \rho^* u T^*$ 는 대류로 인한 무차원 에너지 플럭스이다[2].

벽에서의 Sherwood 수는 용기 내 확산에 의한 물질 전달에 대한 물질 전달의 합으로 정의된다. 자연 대류가 없는 경우, 농도장은 확산에 의해 지배되며 Sherwood 수는 1과 같다. 벽에서 물질 전달이 발생하지 않으면 농도 기울기가 0이 되므로 Sherwood 수는 0이 된다. Sherwood 수는 자연 대류 효과로 인해 벽에서 물질 전달(농도 기울기)이 증가함을 보여준다[2].

$$Sh_y = h_m H / \rho D_{AB} = (1 / (1 - (\omega^* \Delta \omega + \omega_A))) (\partial \omega^* / \partial x^*)|_{x^*=0}$$

증기와 벽 사이의 계면에서의 확산 대류 질량 플럭스는  $[\rho D_{AB} / (1 - \omega)] (\partial \omega / \partial x)|_{x=0} = h_m (\omega_{A,s} - \omega_{A,c})$ 로 표현될 수 있으며, 국소 Sherwood 수를 유도할 수 있다.

## 2.2. 수치해석방법

수치해석은 Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equations Revised(SIMPLER)[14]를 사용하여 경계 조건과 함께 연속성, 운동량, 에너지 및 질량 농도 방정식을 포함한 모든 지배 방정식을 수치적으로 계산했다.

## 3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>( $M_A = 472.086 \text{ g/gmol}$ )의 분자량, Br<sub>2</sub>( $M_B = 159.83 \text{ g/gmol}$ )의 분자량을 가진 조건, 즉,  $M_A \neq M_B$ 의 경우를 고려한다. 이러한 조건에서는, 기상에서의 전달 현상은 매우 복잡하다. 그 이유는, 첫째, 온도(temperature) 및/또는 용질(solute) 부력(buoyancy)에 의해 유도되는 대류가 결합되어 있기 때문이다. 둘째, 기상에서 염화수은(I)(Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)(A)의 물리적 증기 전달현상 동안에 공급원과 결정 계면에서 염화수은(I)(Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)(A)의 질량 플럭스를 반영하는 대류의 효과가 매우 중요하기 때문이다. 본 연구에서 고려하는 시스템은 주로 공급원과 결정 계면에서 성분 Br<sub>2</sub> (B)의 두 가지 다른 분압,  $P_B = 10 \text{ Torr}$  및  $200 \text{ Torr}$ 에 대한 Nusselt 수와 Sherwood 수의 관계에 초점을 맞춘다. 본 연구에서 사용된 주요 매개변수는 Table 1에 나와 있다:  $\Delta T = 50^\circ\text{C}$ ,  $P_B = 20 \text{ Torr}$ ,  $100 \text{ Torr}$ 에서의 염화수은(I)(Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)(A)-Br<sub>2</sub>(B) ( $M_A$

Table 1

Physico-chemical properties of  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2(\text{A})\text{-Br}_2(\text{B})$  ( $M_A = 472.086$ ,  $M_B = 159.83$ ) at the conditions of  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , aspect ratio = 1 with the length of 5 cm, the width of 5 cm

Parameter	$P_B = 10$ Torr	$P_B = 200$ Torr
Kinematic viscosity	$0.4 \text{ cm}^2/\text{sec}$	$0.18 \text{ cm}^2/\text{sec}$
Thermal diffusivity	$0.0096 \text{ cm}^2/\text{sec}^2$	$0.0017 \text{ cm}^2/\text{sec}^2$
Binary diffusivity	$0.6 \text{ cm}^2/\text{sec}^2$	$1.14 \text{ cm}^2/\text{sec}^2$
Coefficient of thermal volume expansion	$0.0017 (1/^\circ\text{C})$	$0.0017 (1/^\circ\text{C})$
Density of mixture	$0.00067 \text{ g/cm}^3$	$0.0015 \text{ g/cm}^3$
Prandtl number	41	106
Lewis number	0.01	0.01
Peclet number	1.19	0.17
Concentration number	1.43	6.23
Thermal Grashof number	$1.35 \times 10^4$	$6.36 \times 10^4$
Solutal Grashof number	$1.65 \times 10^5$	$3.41 \times 10^5$

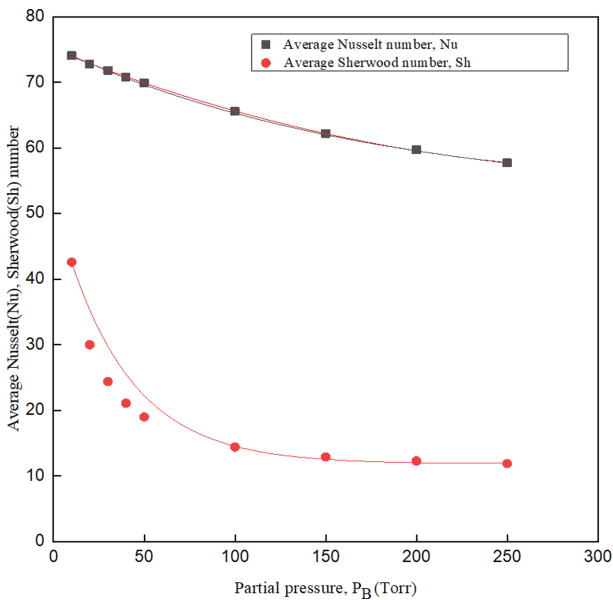


Fig. 2. Effects of partial pressure,  $P_B$  (Torr) on average Nusselt number, Nu and average Sherwood number, Sh for  $10 \leq P_B$  (Torr)  $\leq 200$  at crystal region, based on the conditions of  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , aspect ratio = 1 with the length of 5 cm, the width of 5 cm.

=  $472.086 \text{ g/gmol}$ 의 분자량,  $\text{Br}_2(M_B = 159.83 \text{ g/gmol})$ .

Figure 2는  $10 \leq P_B(\text{Torr}) \leq 200$ , 결정벽면에서, 분압  $P_B$ 의 변화에 따라 평균 Nusselt 수, Nu와 평균 Sherwood 수, Sh가 어떻게 변화하는 지를 나타내고 있다. 고려되

Table 2

Summary of average Nusselt number, Nu and average Sherwood number, Sh at crystal region, based on the conditions of  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , aspect ratio = 1 with the length of 5 cm, the width of 5 cm

$P_B$ (Torr)	Average Nusselt number, Nu	Average Sherwood number, Sh
10	74.1	42.6
20	72.8	30.0
30	71.8	24.4
40	70.8	21.1
50	69.9	19.0
100	65.6	14.4
150	62.2	12.9
200	59.7	12.3
250	57.7	11.9

는 공정조건은  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , Ar(aspect ratio) = 1, 길이 = 5 cm, 폭 = 5 cm. Figure 2는  $P_B = 10$  Torr에서 200 Torr의 변화에서, 평균 Nusselt 수는 분압  $P_B$ 가 선형적으로 감소하고 있으며, 평균 Sherwood 수는  $10 \leq P_B$  (Torr)  $\leq 50$ 의 영역에서는 지수적함수로 감소하고 있으며,  $100 \leq P_B(\text{Torr}) \leq 250$ , 변화가 거의 없는 것으로 나타나고 있다. Table 2는 Fig. 2에 해당하는 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수를 요약 정리하여 나타낸 것이다.  $P_B = 100$  Torr에서, 평균 Sherwood 수, Sh = 12.9이며,  $P_B = 250$  Torr에서, 평균 Sherwood 수, Sh = 11.9이다. 평균 Nusselt 수는  $P_B = 10$  Torr, 74.1이며,  $P_B = 250$  Torr

Table 3

Summary of average Nusselt number, Nu and average Sherwood number, Sh for  $P_B = 10$  Torr, 200 Torr, at crystal and source region, based on the conditions of  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , aspect ratio = 1 with the length of 5 cm, the width of 5 cm

	$P_B = 10$ Torr		$P_B = 200$ Torr	
	Source	Crystal	Source	Crystal
Average Nusselt number, Nu	$4.59 \times 10^{-5}$	74.1	11.2	59.7
Average Sherwood number, Sh	37.2	42.6	11.6	12.3

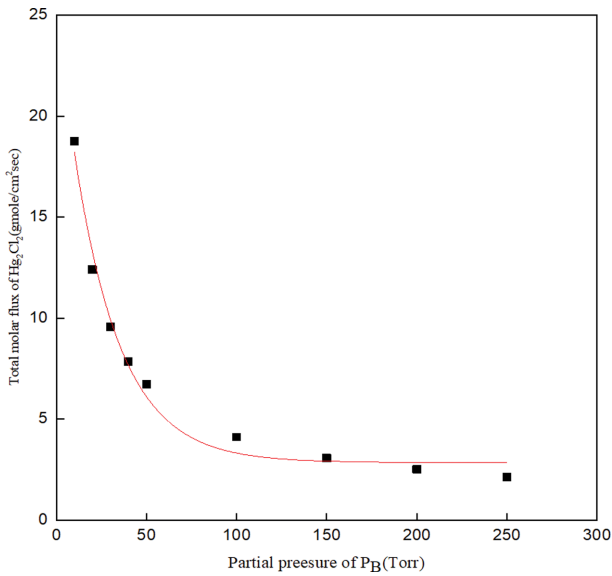


Fig. 3. Effects of partial pressure,  $P_B$  (Torr) on the total molar flux of  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ ,  $10 \leq P_B$  (Torr)  $\leq 200$  at crystal region, based on the conditions of  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , aspect ratio = 1 with the length of 5 cm

에서는, 57.7이다. 분압  $P_B$ 의 변화에 대한 평균 Nusselt 수의 변화에 대한 감소 기울기는  $-0.068(1/\text{Torr})$ 이다. Table 3은 결정과 소스영역에서,  $P_B = 10$  Torr, 200 Torr에 대한 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수를 요약정리한 것이다: 조건은  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ , 익스펙트비 = 1이다. Table 3에서 보는 바와 같이, 결정영역에서의 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수가 소스영역에서의 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수보다 비교적 크다. 또한, 이것은  $P_B = 10$  Torr, 200 Torr에 대하여서도, 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수가 소스영역에서의 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수보다 비교적 크다.

Figure 3은  $10 \leq P_B(\text{Torr}) \leq 200$ , 결정 벽면에서, 분압  $P_B$ 의 변화에 따라 총몰랄 플럭스( $\text{g/gmol/cm}^2\text{sec}$ )가 어떻게 변화하는지를 나타내고 있다. 분압  $P_B$ 의 변화에 따라  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$  ( $M_A = 472.086$  g/gmol)의 총몰랄 플럭스( $\text{g/gmol/cm}^2\text{sec}$ )가 지수 함수로 감소하고 있음을 보여주고 있다. 이러한 경향성은 대류에 의한 물질전달을 나타내는 평균 Sherwood 수의 경향성과 같은 결과를 보여주

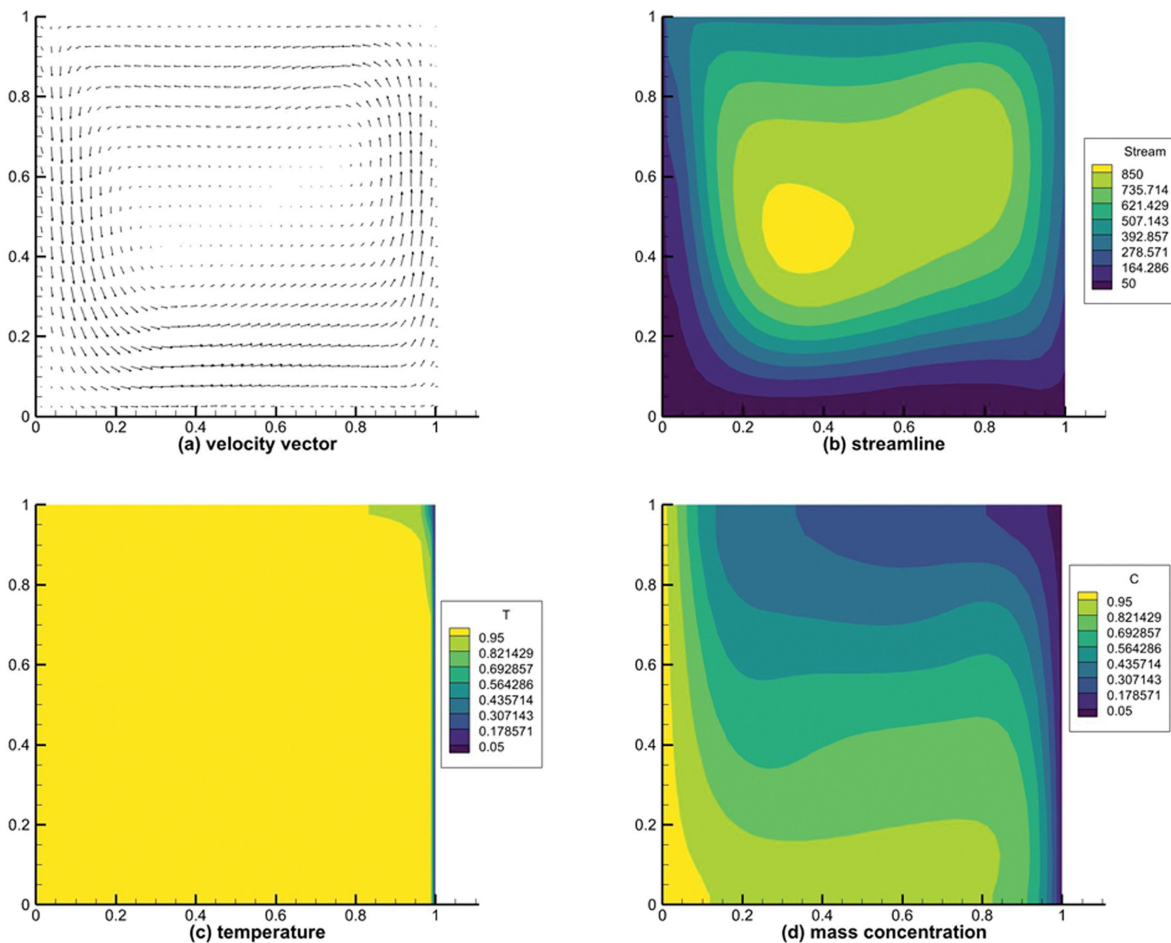


Fig. 4. (a) velocity vector, (b) streamline, (c) temperature, (d) mass concentration profile.  $P_B = 10$  Torr, thermal Grashof number ( $Gr_T$ ) =  $1.35 \times 10^4$ , solutal Grashof number ( $Gr_S$ ) =  $1.65 \times 10^5$ , Prandtl number ( $Pr$ ) = 41.5, Lewis number ( $Le$ ) = 0.01, Peclet number ( $Pe$ ) = 1.19, concentration parameter ( $C_v$ ) = 1.43,  $|U|_{\max} = 9.09$  cm/sec.  $Ar = 1$  and  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$  ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ ) are fixed.

고 있다.  $10 \leq P_B(\text{Torr}) \leq 50$ 의 영역에서는  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2(M_4 = 472.086 \text{ g/gmol})$ 의 총몰랄 플럭스( $\text{g/gmol/cm}^2\text{sec}$ )가 지수 함수로 급격히 감소하고 있으며,  $100 \leq P_B(\text{Torr}) \leq 250$ , 변화가 거의 없는 것으로 나타내고 있다.

Figure 4는 속도 벡터, 유선, 등온선, 등질량 농도 등 고선을 보여줍니다. 정사각형 용기 내부의 속도장을 보여주기 위해 속도 벡터와 함께 유선도 제시되며,  $|U|_{\max} = 9.09 \text{ cm/sec}$ 이다. 속도 벡터의 차원적 최대 크기는 정사각형 용기 내부의 대류 강도를 나타냅니다. 증기 상태에서는 단일 대류 롤(roll)이 존재하는 것으로 나타났습니다. 유동 구조는  $y^* = 0.5$  및 3차원 유동 구조와 비대칭입니다. 바닥 영역에서 수송 길이를 따라 유동 영역, 즉  $0 \leq y^* \leq 0.5$ 의 경우 1차원 스테판(Stefan) 유동이 나타납니다. Figure 4(c)에 표시된 온도 프로파일은  $0 \leq x^* \leq 1$ 의 단열조건의 벽에 대한 열 경계 조건과 관련이 있다. Figure 4(d)에 표시된 질량 농도의 가까운 간격은 확산 제한 물질 전달의 메커니즘을 보여준다. 계면 반응 속도가 충분히 빠르면 실제 계면 증기압은 포화 증기압과 같다. 다시 말해, 물질 전달이 속도 제한(또는 속도 결정 또는 속도 제어) 단계일 때, 계면에서의 실제 증기압은 성장하는 결정의 포화 압력에 가깝다. 따라서, 물질

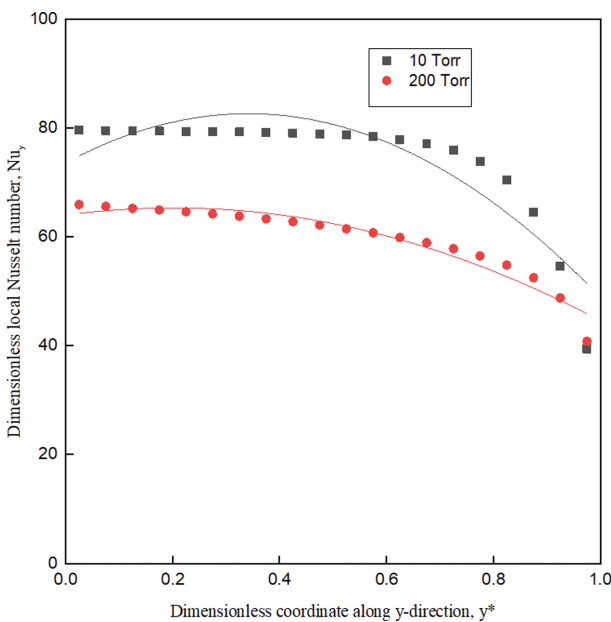


Fig. 5. Dimensionless local Nusselt number (heat flux due to convection plus diffusion-advection),  $Nu_y$  for dimensionless coordinate along the  $y$ -direction,  $y^*$  at the right cold wall (the crystal region), for (a)  $P_B = 10 \text{ Torr}$ , thermal Grashof number ( $Gr_T$ ) =  $1.35 \times 10^4$ , solutal Grashof number ( $Gr_S$ ) =  $1.65 \times 10^5$ , Prandtl number ( $Pr$ ) = 41.5, Lewis number ( $Le$ ) = 0.01, Peclet number ( $Pe$ ) = 1.19, concentration parameter ( $C_c$ ) = 1.43; (b)  $P_B = 200 \text{ Torr}$ , thermal Grashof number ( $Gr_T$ ) =  $6.36 \times 10^4$ , solutal Grashof number ( $Gr_S$ ) =  $3.41 \times 10^5$ , Prandtl number ( $Pr$ ) = 106, Lewis number ( $Le$ ) = 0.01, Peclet number ( $Pe$ ) = 0.17, concentration parameter ( $C_c$ ) = 6.23.  $Ar = 1$  and  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$  ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ ) are fixed.

농도의 가까운 간격은 확산으로 인한 물질 전달의 저항을 반영합니다.

Figure 5는 오른쪽 저온 벽(결정 영역)에서 무차원 국소 Nusselt 수  $Nu_y$ 가 불순물인 브롬화 기체,  $\text{Br}_2$ (성분 B)의 두 가지 다른 분압  $P_B = 10$  및  $P_B = 200 \text{ Torr}$ 에 대해  $y$  방향,  $y^*$ 를 따라 무차원 좌표와 함께 감소하는 것을 보여준다. 결정영역에서 10 Torr의 불순물인 브롬화 기체,  $\text{Br}_2$ (성분 B) 압력에 대한 무차원 국소 Nusselt 수는 200 Torr보다 대략 1.3배 정도로 크다. 오른쪽 저온 벽(결정 영역)에서 무차원 국소 Nusselt 수,  $Nu_y$ 는  $y$  방향,  $y^*$ 를 따라 무차원 좌표와 함께 비선형적이고 감소한다.

$P_B = 10 \text{ Torr}$ 의 경우에, 열 Grashof 수( $Gr_T$ ) =  $1.35 \times 10^4$ , 용질 Grashof 수( $Gr_S$ ) =  $1.65 \times 10^5$ , Prandtl 수( $Pr$ ) = 41.5, Lewis 수( $Le$ ) = 0.01, Peclet 수( $Pe$ ) = 1.19, 농도 매개변수(concentration parameter,  $C_c$ ) = 1.43; (b)  $P_B = 200 \text{ Torr}$ , 열 Grashof 수( $Gr_T$ ) =  $6.36 \times 10^4$ , 용질 Grashof 수( $Gr_S$ ) =  $3.41 \times 10^5$ , Prandtl 수( $Pr$ ) = 106, Lewis 수( $Le$ ) = 0.01, Peclet 수( $Pe$ ) = 0.17, 농도매개변수(concentration parameter,  $C_c$ ) = 6.23. 엑스펙트 비( $Ar$ ) = 1,  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ )은 고정된 공정 조건이다.

Figure 6은  $P_B = 200 \text{ Torr}$ , 열 Grashof 수( $Gr_T$ ) =  $6.36 \times 10^4$ , 용질 Grashof 수( $Gr_S$ ) =  $3.41 \times 10^5$ , Prandtl 수( $Pr$ ) = 106, Lewis 수( $Le$ ) = 0.01, Peclet 수( $Pe$ ) = 0.17, 농도매개변수(concentration parameter,  $C_c$ ) = 6.23,  $|U|_{\max} = 4.56 \text{ cm/sec}$ 를 기반으로 한 속도 벡터, 유선, 등온선, 등질량 농도 등고선을 보여준다. 엑스펙트 비( $Ar$ ) = 1,  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ )은 고정되어 있다. Figure 4와 같은 경향으로, Fig. 6은 기상에서 단일 대류 롤이 나타나는 것을 보여준다. 유동 구조는  $y^* = 0.5$ 에서 비대칭적이며 3차원 유동 구조를 보여주고 있다.

#### 4. 결 론

결정 영역, 10 Torr와 200 Torr의 브롬화 기체( $\text{Br}_2$ )인 성분 B,  $P_B$  압력에 따른 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수의 변화를 수치 해석적으로 규명하였다. 평균 Nusselt 수와 평균 Sherwood 수는 브롬화 기체( $\text{Br}_2$ )인 성분 B,  $P_B$  분압이 증가함에 따라 선형적으로, 그리고 지수 함수적으로 각각 감소하는 것으로 나타났다. 또한, 브롬화 기체( $\text{Br}_2$ )인 성분  $\text{Br}_2$ 의 두 가지 다른 분압, 10 Torr와 200 Torr에 대해 소스 영역의 평균 Nusselt 수가 결정 영역의 평균 Nusselt 수보다 크고, 소스 영역의 평균 Sherwood 수가 결정 영역에 비해 3배 증가하는 것으로 나타났다.

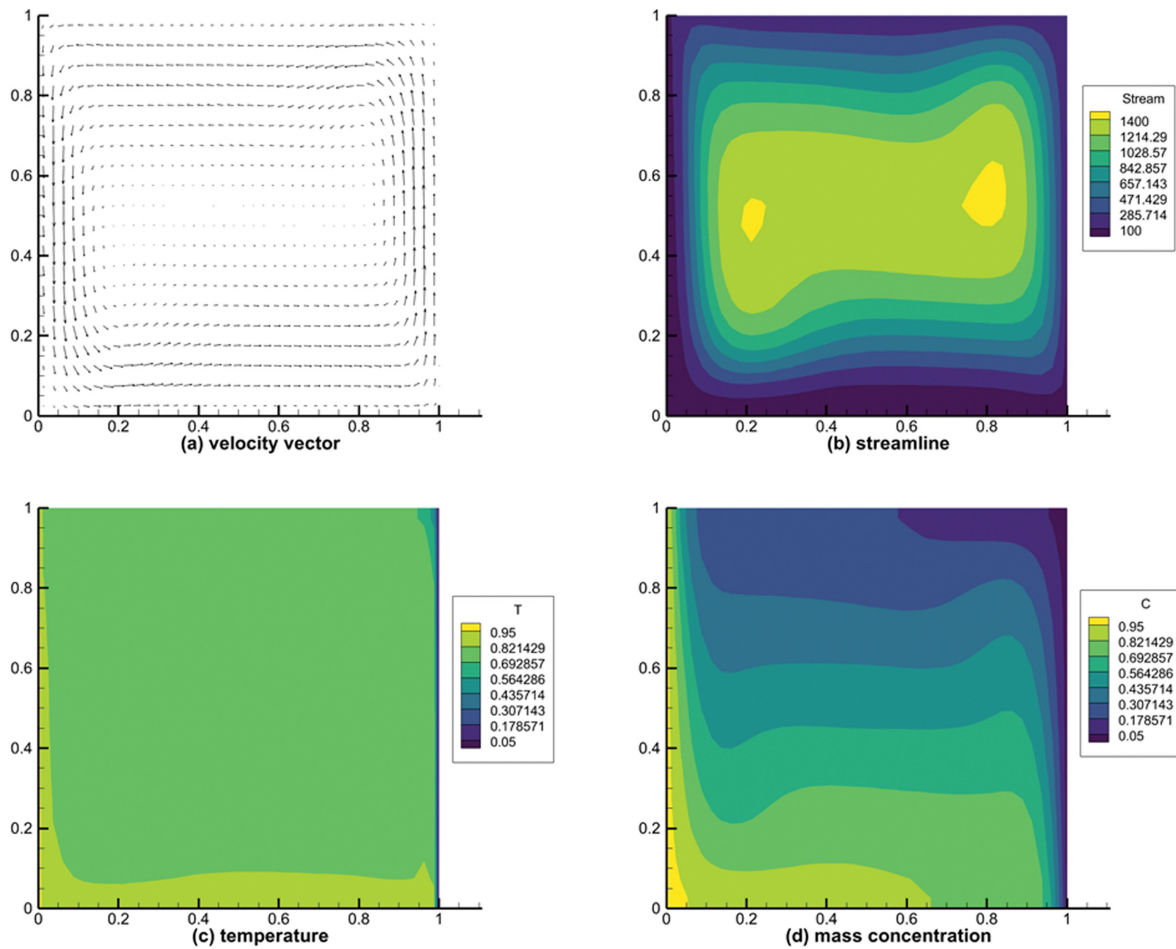


Fig. 6. (a) velocity vector, (b) streamline, (c) temperature, (d) mass concentration profile, based on  $P_B = 200$  Torr, thermal Grashof number ( $Gr_t$ ) =  $6.36 \times 10^4$ , solutal Grashof number ( $Gr_c$ ) =  $3.41 \times 10^5$ , Prandtl number ( $Pr$ ) = 106, Lewis number ( $Le$ ) = 0.01, Peclet number ( $Pe$ ) = 0.17, concentration parameter ( $C_c$ ) = 6.23,  $|U|_{\max} = 4.56$  cm/sec.  $Ar = 1$  and  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$  ( $290^\circ\text{C} \rightarrow 280^\circ\text{C}$ ) are fixed.

## 감사의 글

이 논문은 2025학년도 한남대학교 학술연구비 지원에 의하여 연구되었습니다(연구과제번호 2025A168).

## References

- [ 1 ] W. B. Duval, "Transition to chaos in the physical transport process—I", the Proceeding of the ASME-WAM Winter Annual meeting, Fluid mechanics phenomena in microgravity, ASME-WAM, Nov. 28 -- Dec. 3, New Orleans, Louisiana (1993).
- [ 2 ] 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.
- [ 3 ] J.A. Weaver and R. Viskanta, "Natural convection due to horizontal temperature and concentration gradients -2. Species interdiffusion, Soret and Dufour effects", *thermophysical property effects*", *Int. J. Heat and Mass Transf.* 34 (1991) 3121.
- [ 4 ] A.A. Kaplyanskii, V.V. Kulakov, Yu.F. Markov and Ć. Barta, "The soft mode properties in Raman spectra of improper ferroelastics  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$  and  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$ ", *Solid State Commun.* 21 (1977) 1023.
- [ 5 ] M. Dalmon, S. Nakashima, S. Komatsubara and A. Mitsuishi, "Softening of acoustic and optical modes in ferroelastic phase in  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$ ", *Solid State Commun.* 28 (1978) 815.
- [ 6 ] J.S. Kim, S.B. Trivedi, J. Soos, N. Gupta and W. Palosz, "Growth of  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$  and  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$  single crystals by physical vapor transport", *J. Cryst. Growth* 310 (2008) 2457.
- [ 7 ] K.A. McCarthy, A.P. Goutzoulis, M. Gottlieb and N.B. Singh, "Optical rotatory power in crystals of the mercurous halides and tellurium dioxide", *Opt. Commun.* 64 (1987) 157.
- [ 8 ] N.B. Singh, M. Gottlieb, R.H. Hopkins, R. Mazelsky, W.M.B. Duval and M.E. Glicksman "Physical vapor transport growth of mercurous chloride crystals", *Prog. Crystal Growth and Charact.* 27 (1993) 201.
- [ 9 ] 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 crys-

- tals: mercurous bromide system”, *J. Cryst. Growth* 137 (1994) 155.
- [10] P.M. Amarasinghe, J.S. Kim, H. Chen, S. Trivedi, S.B. Qadri, J. Soos, M. Diestler, D. Zhang, N. Gupta and J.L. Jensen, “Growth of high quality mercurous halide single crystals by physical vapor transport method for AOM and radiation detection applications”, *J. Cryst. Growth* 450 (2016) 96.
- [11] T.H. Kim, H.T. Lee, Y.M. Kang, G.E. Jang, I.H. Kwon and B. Cho, “In-depth investigation of  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$  crystal growth and evolution”, *Materials* 12 (2019) 4224, <https://doi.org/10.3390/ma12244224>.
- [12] L. Liu, R. Li, L. Zhang, P. Zhang, G. Zhang and S. Xia, “Long wavelength infrared acousto-optic crystal  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$ : Growth optimization and photosensitivity investigation”, *J. Alloys Compd.* 874 (2021) 159943, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159943>.
- [13] G. Tae and M.H. Kwon, “Studies on Nusselt and Sherwood number for diffusion-advective convection during physical vapor transport of  $\text{Hg}_2\text{Br}_2$ ”, *J. Korean Crystal Growth and Crystal Technol.* 31 (2021) 127.
- [14] S.V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, (Hemisphere Publishing Corp., Washington D. C., 1980) p. 131.