

СТРУКТУРНІ ТА ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РІДКИХ ЛУЖНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

П. М. Якібчук¹, В. Р. Пацаган¹, Т. М. Пацаган²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра фізики металів,

вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна.

²Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна.

(Отримано 28 вересня 2006 р.; в остаточному вигляді — 18 квітня 2007 р.)

За допомогою методу молекулярної динаміки вивчено структурні та динамічні властивості рідких лужноземельних металів. Для опису досліджуваних систем використано парний між-йонний потенціал, розрахований на основі електрон-йонного модельного потенціалу Фіолгаїса [C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster, J. M. MacLaren, M. Braczkowska, Phys. Rev. B **51**, 14001 (1995)]. Обчислено автокореляційні функції швидкостей і функції середньоквадратичного зміщення, на їх основі отримано коефіцієнти самодифузії. Визначено температурну залежність коефіцієнта самодифузії для Ca, Mg, Sr та Ba і пораховано коефіцієнти в'язкості цих металів. Проведено порівняння результатів розрахунків із результатами, отриманими в інших теоретичних підходах. Відзначено добре узгодження одержаних результатів з експериментальними даними.

Ключові слова: лужноземельні метали, псевдопотенціал, молекулярна динаміка, самодифузія.

PACS number(s): 61.20.Ne, 61.25.Mv, 31.15.Qg

I. ВСТУП

Протягом останнього десятиліття вивчення динамічних властивостей рідких металів стало предметом багатьох як експериментальних, так і теоретичних досліджень [2, 3]. При цьому найбільшу увагу приділено лужним металам [4–8], меншу — лужноземельним [9–11]. У згаданих роботах найчастіше використовували методи непружного нейтронного розсіяння [11] та молекулярної динаміки (МД) [9, 10]. Метод МД дає змогу описувати рідини на мікроскопічному рівні, оскільки забезпечує докладну інформацію про траєкторії атомів, що доповнює дані, отримані з експерименту, а також дає змогу дослідити динамічні властивості, які дуже важко (а в багатьох випадках неможливо) реалізувати в експерименті.

Важливим етапом в реалізації моделювання за допомогою методу МД є розрахунок ефективних потенціалів міжйонної взаємодії, які можна визначити в межах методу модельного потенціалу, що запропонував Фіолхаїс [1]. Знаючи ці потенціали та застосувавши метод МД, можна розрахувати структурні та динамічні властивості рідких лужноземельних металів. Зауважимо, що наявні експериментальні дослідження стосуються, головним чином, структурних властивостей і майже не вивчають динамічних характеристик, тому застосування методу МД з такою метою є дуже актуальним.

Добре відомими є праці з дослідження структурних і динамічних властивостей групи лужноземельних металів [9, 11], у яких для опису електрон-йонної взаємодії використовують різні модельні потенціали (МП).

Зокрема в [11] для вивчення структурних властивостей застосовано МП, отриманий за допомогою методу нейтрального псевдоатому (NPA). У [10] проведено розрахунки з використанням МП Гонсалеса [11] для вивчення динамічних властивостей. У праці Вакса та ін. [9] використано МП Фіолхаїса [1] для одержання ряду структурних та динамічних властивостей лужноземельних металів.

Метою нашої роботи є дослідження методом МД динамічних властивостей низки лужноземельних металів, зокрема температурної залежності їхнього коефіцієнта самодифузії. Для цього ми розраховували міжйонні потенціали на основі МП Фіолхаїса, який, на думку авторів [1], має низку переваг над іншими МП, а саме: при $r \rightarrow 0$ цей потенціал набуває скінченного значення і має рівну нулеві першу та третю похідні. Його аналітична форма забезпечує швидку збіжність формфактора при великих q ($\lim_{q \rightarrow \infty} w(q) \sim q^{-8}$).

Проводячи комп'ютерне моделювання, автори зауважили, що доцільно провести розрахунки для більшої кількості частинок ($N = 3801$), яка припадає на комірку моделювання, ніж це зроблено в попередніх роботах. Такий крок дасть змогу збільшити радіус обрізання парного потенціалу міжчастинкової взаємодії до розмірів, де цією взаємодією можна повністю знехтувати ($\ll 1\%$ порівняно із глибиною ями потенціалу), чого не можна стверджувати стосовно роботи [9], де обрізання робили на відносно невеликих відстанях і значення потенціалу залишалося все ще суттєвим (для окремих металів $> 10\%$). Отже, збільшуючи кількість частинок у системі та радіус обрізання потенціалу взаємодії, можна сподіватися на підвищення точності отриманих результатів у цій праці.

II. ТЕОРІЯ

A. Міжйонний парний потенціал

Описати міжйонну взаємодію в лужноземельних металах можна за схемою, аналогічною до тієї, що використовували для простих металів [12]. Ефективний потенціал міжйонної взаємодії зображають як суму парного кулонівського потенціалу та непрямой взаємодії йонів через електрони провідності:

$$u(r) = \frac{Z^2}{r} - \frac{2Z^2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (1)$$

Тут $F_N(q)$ — характеристична функція зонної структури [13], яку в другому порядку теорії збурень за електрон-йонним псевдопотенціалом записуємо у вигляді [13]:

$$F_N(q) = \left(-\frac{q^2 \Omega}{2\pi Z^2} \right) \frac{\Omega q^2}{8\pi} \left(\frac{1 - \varepsilon^H(q)}{\varepsilon^*(q)} \right) w_0^2(q). \quad (2)$$

У формулі (2) $w_0(q)$ — неекранований формфактор модельного потенціалу (МП), $\varepsilon^*(q)$ — статична діелектрична функція електронного газу, що враховує поправку на обмін і кореляцію за допомогою функції $\varphi(q)$

$$\varepsilon^*(q) = 1 + [\varepsilon^H(q) - 1][1 - \varphi(q)], \quad (3)$$

$\varepsilon^H(q)$ — діелектрична проникність електронного газу, розрахована в наближенні Гартрі [12].

$$\varepsilon^H(q) = 1 + \frac{1}{2\pi k_F \eta} \left[\frac{1 - \eta^2}{2\eta} \ln \left| \frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right| + 1 \right], \quad (4)$$

де $\eta = q/2k_F$ — безрозмірний імпульс розсіювання.

Функція $\varphi(q)$ враховує обмінно-кореляційні ефекти в електронному газі. У нашій роботі цю взаємодію буде взято до уваги в наближенні Гчімару–Уцумі [14], оскільки саме це наближення дає змогу найповніше врахувати вказані ефекти.

Для опису електрон-йонної взаємодії використаємо локальний модельний потенціал [1]:

$$w_0(r) = -\frac{Z}{R} \left\{ \frac{1}{x} [1 - (1 + \beta x) \exp(-\alpha x)] - A \exp(-x) \right\}, \quad (5)$$

де $x = r/R$, R — радіус кору. Параметри A і β виражаються через величину α :

$$A = \frac{\alpha^2}{2} - \alpha\beta, \quad \beta = \frac{\alpha^3 - 2\alpha}{4(\alpha^2 - 1)}. \quad (6)$$

Автори [1] визначили два набори параметрів — індивідуальні та універсальні. Як показано в [9], при чисельних розрахунках структурних і динамічних властивостей точніші результати порівняно з експериментом отримують, використавши індивідуальний набір.

Тому в нашій статті ми застосуємо індивідуальний набір параметрів для МП (5).

Неекранований формфактор МП (5) визначаємо так:

$$w_0(q) = 4\pi Z R^2 \frac{N}{V} \left[-\frac{1}{(qR)^2} + \frac{1}{(qR)^2 + \alpha^2} + \frac{2\alpha\beta}{[(qR)^2 + \alpha^2]^2} + \frac{2A}{[(qR)^2 + 1]^2} \right]. \quad (7)$$

B. Структурні та динамічні властивості рідких металів у методі молекулярної динаміки

Розраховані за допомогою МП потенціали міжйонної взаємодії можна використати для вивчення структурних та динамічних властивостей рідких металів. Як відзначалося раніше, нас цікавлять рідкі лужноземельні метали (Be, Mg, Ca, Sr, Ba), які частково вивчали в працях [9, 11]. Дослідження проводимо методом комп'ютерного моделювання — молекулярної динаміки (МД), який є найефективнішим засобом для розрахунку одночастинкових динамічних властивостей, оскільки дає змогу отримати в процесі моделювання, окрім координат частинок, ще і їхні швидкості. Моделювання відбувалося при постійній густині системи і заданій середній температурі. Також на систему накладали граничні періодичні умови. Для збільшення точності розрахунків узято 3801 частинку (N), що припадають на одну комірку, тоді як інші дослідники брали на порядок меншу кількість ([10] — 854 , [9] — 256). Розміри комірки L визначали з умов $\rho = N/V$, $L = V^{1/3}$. Траєкторії частинок розраховували за алгоритмом Верле [15, 16]. Обрізання потенціалу міжйонної взаємодії відбувалося на віддалі, меншій, ніж половина розміру комірки моделювання і одночасно на найдальшій віддалі, при якій сила взаємодії між частинками дорівнює нулеві (20–30 Å). Система частинок, які в початковий момент розташовувалися впорядковано, приводилася в рівновагу при відповідній температурі протягом 10000 кроків. Отже, система переходила в рідкий стан, і після її врівноваження (стан, у якому середня енергія системи залишається сталою) відбувався розрахунок характеристик рідких металів, таких, як радіальні функції розподілу $g(r)$, статичні структурні фактори $S(q)$, автокореляційні функції швидкостей $\psi(t)$ (АКФШ) та функції середньо-квадратичного зміщення $\sigma(t)$ (СКЗ). Цей розрахунок проводили за умов постійної енергії в системі, тобто в мікросканонічному ансамблі.

Важливою характеристикою невпорядкованих систем є радіальна функція розподілу, оскільки саме вона забезпечує статистичний опис досліджуваної системи. Знаючи розташування частинок у комірниці і використовуючи їхні відносні віддалі, можна поррахувати $g(r)$:

$$g(r) = \frac{1}{\rho N} \left\langle \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \delta[r - r_{ij}] \right\rangle, \quad (8)$$

де ρ — густина частинок, N — кількість частинок.

Використовуючи фур'є-перетворення, можна отримати структурний фактор $S(q)$:

$$S(q) = 1 + \rho \int [g(r) - 1] \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (9)$$

Для вивчення динамічних властивостей рідини дуже важливим є знання автокореляційної функції швидкостей $\psi(t)$ та середньоквадратичного зміщення $\sigma(t)$. Розрахунок $\psi(t)$ вимагає тривалішого моделювання, оскільки ця характеристика є часозалежною і, окрім того, її потрібно усереднювати як за ансамблем, так і за різними часовими інтервалами. Унаслідок моделювання $\psi(t)$ можна визначити з такого співвідношення:

$$\psi(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t) \mathbf{v}_i(0). \quad (10)$$

СКЗ залежить тільки від координат і є простішою в розрахунку:

$$\sigma(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2. \quad (11)$$

Обидві ці функції використовують для розрахунку коефіцієнта самодифузії D . Зокрема, згідно з формулою Гріна–Кубо, коефіцієнт самодифузії має вигляд:

$$D = \frac{kT}{m} \int_0^\infty \psi^*(t) dt, \quad (12)$$

де $\psi^*(t)$ — тут є нормованою автокореляційною функцією швидкостей, яку можна записати як

$$\psi^*(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{v}_i(t) \mathbf{v}_i(0)}{\mathbf{v}_i(0) \mathbf{v}_i(0)}. \quad (13)$$

Слід зазначити, що для визначення коефіцієнта самодифузії D із $\sigma(t)$ необхідно брати суттєво більші часи руху частинок по траєкторії, оскільки D , розрахований із СКЗ, має зміст лише на відрізку, де $\sigma(t)$ є практично лінійною щодо часу. У такому разі для розрахунку коефіцієнта самодифузії можна скористатися формулою Айнштайна:

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial \sigma(t)}{\partial t}. \quad (14)$$

Отже, якщо для $\psi(t)$ ми можемо обмежитися, для прикладу, часом у ~ 1 пс, то для $\sigma(t)$ необхідно ~ 10 пс залежно від металу та умов, за яких він перебуває. Тому при обчисленні згаданих динамічних властивостей для досліджуваних систем використовували до 50000 кроків моделювання при часовому інтервалі 0.001 пс.

Маючи потенціал міжйонної взаємодії і розрахувавши радіальну функцію розподілу, можна отримати потенціальну енергію системи E_p , її тиск P і пронормовану теплоємність C_V^* [17]:

$$\frac{E_p}{N} = 2\pi\rho \int_0^\infty u(r)g(r)r^2 dr, \quad (15)$$

$$P = \frac{N}{V} k_B T - \frac{1}{3V} \left\langle \sum_i^N \sum_{j>i}^N \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} r_{ij} \right\rangle, \quad (16)$$

$$C_V^* = \frac{C_V}{Nk_B} = \frac{3}{2} \left[1 + \frac{3}{2} \frac{N \langle \delta E_p^2 \rangle}{\langle E_k \rangle^2} \right], \quad (17)$$

де $\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} N k_B T$ кінетична енергія системи.

Ще однією характеристикою, яка викликає зацікавленість і вивчається в цій роботі, є температурна залежність коефіцієнта самодифузії D . У праці [5] такі дослідження проводили для Mg та Ca. Автори показали, що значення D дещо збільшується зі збільшенням частинок у комірі моделювання. Ми встановили цю залежність для Ba, Ca, Mg та Sr.

Використовуючи формулу Гріна–Кубо для в'язкості, розрахували цей коефіцієнт для низки лужноземельних металів [18]:

$$\eta = \frac{V}{kT} \int_0^\infty dt \langle P_{\alpha\beta}(0) P_{\alpha\beta}(t) \rangle, \quad (18)$$

де $\langle P_{\alpha\beta}(0) P_{\alpha\beta}(t) \rangle$ — автокореляційна функція тензора тиску.

Тензор тиску записуємо у вигляді:

$$P_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{V} \left[\sum_i m v_{i\alpha}(t) v_{i\beta}(t) + \sum_i r_{i\alpha}(t) f_{i\beta}(t) \right], \quad (19)$$

тут $\alpha\beta = xy, xz, yx, yz, zx$ і zy .

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

За формулами (1)–(7) ми розрахували ефективні потенціали міжйонної взаємодії для рідких лужноземельних металів. У процесі реалізації методу моделювання МД пораховано радіальні функції розподілу (8) та структурні фактори (9) для всіх лужноземельних металів. Оскільки розміри комірок моделювання для досліджуваних систем були достатньо великими, то в цьому розрахунку вдалося непогано описати структурний фактор при малих q , хоча точність розрахунку в цій ділянці все ще низька. Порівняння розрахованого статичного структурного фактора для рідких лужноземельних металів при $T \sim T_{пл}$ показує добре узгодження з експериментальними даними [19]. Слід зазначити, що збільшення кількості частинок у комірі

моделювання і більший радіус обрізання потенціалу не вплинули на чисельне значення структурних властивостей цієї групи металів.

При розрахунку структурних характеристик пороховано також середні значення кінетичної та потенціальної енергії для кожного з металів. У таблиці 1 наведено енергії та теплоємності лужноземельних ме-

талів. Порівняння отриманих значень потенціальної енергії з даними [9] показали певну розбіжність. Загальна тенденція цього відхилення полягає в невеликій відмінності потенціальної енергії фактично для всіх металів. Очевидно, це пов'язано із залежністю отримуваних результатів від радіуса обрізання потенціалу.

	T, K	$\rho, \text{\AA}^{-3}$	$E_p, \text{kJ/mol}$	P, kbar	C_V^*	$C_V^* [9]$
Be	1560	0.11300	109.99	526.110	2.98	3.20
Mg	989.3	0.03896	33.74	85.321	3.16	3.52
Ca	1148	0.02026	23.64	38.804	2.97	3.11
Sr	1041	0.01605	23.06	30.004	3.12	3.38
Ba	1004	0.01451	24.46	27.381	3.13	3.33

Таблиця 1. Середні значення температури, потенціальної енергії, тиску та теплоємності лужноземельних металів, отримані в цій роботі.

	T, K	$D_\sigma, 10^{-5} \text{cm}^2/\text{c}$	$D_\psi, 10^{-5} \text{cm}^2/\text{c}$	$D_\sigma, 10^{-5} \text{cm}^2/\text{c} [9]$	$D_\psi, 10^{-5} \text{cm}^2/\text{c} [9]$	$D, 10^{-5} \text{cm}^2/\text{c} [10]$
Be	1560	10.64	10.48	10.46	10.41	—
Mg	989	5.84	5.60	5.17	5.37	6.65
Ca	1148	7.88	7.83	5.81	6.25	6.06
Sr	1041	4.52	4.48	4.03	3.91	3.21
Ba	1004	3.69	3.60	3.335	3.29	2.33

Таблиця 2. Коефіцієнти самодифузії лужноземельних металів, пороховані з функцій СКЗ та АКФШ при відповідних температурах.

На рис. 2 показано температурні залежності коефіцієнтів самодифузії Ba, Ca, Mg та Sr, пороховані з АКФШ і СКЗ. Для динамічних властивостей, отриманих за допомогою комп'ютерного моделювання, важко оцінити похибку, тому що на результати впливають багато факторів: кількість частинок, періодичні граничні умови, різні процедури усереднень та особливості парного потенціалу, а отже, і псевдопотенціалу. Вивчення коефіцієнта самодифузії D показало, що одержані результати в цілому непогано узгоджуються з даними авторів [9, 10], а причина відмінності може бути пов'язана із самим методом та деякою різницею температур. Крім того, на динамічні властивості також має вплив радіус обрізання потенціалу. Отримані температурні залежності коефіцієнтів самодифузії дають змогу оцінити значення D для будь-якої температури в цьому інтервалі. Відсутність експериментальних даних для коефіцієнтів самодифузії не дає змоги зробити висновок про їхнє абсолютне значення. Деяку ясність в цьому питанні вносить розрахунок коефіцієнта в'язкості.

На рис. 1 показано функції АКФШ для розглянутих металів. Усі криві якісно відображають поведінку флюїду при високій густині. Про це свідчить чітко виражені ділянки графіків, де функції є від'ємними. Така поведінка виникає внаслідок різкої зміни напрям-

ку руху йона на протилежний за рахунок зіткнення зі своїми сусідами.

У цій праці для розрахунку коефіцієнтів самодифузії за допомогою формули Гріна–Кубо (12) використано АКФШ. Поруч із цим застосовано інший підхід для визначення коефіцієнта D , пов'язаного з функцією середньоквадратичного зміщення $\sigma(t)$ (СКЗ). Для цього визначали коефіцієнт нахилу лінії СКЗ на відрізьку, де ця функція вже вийшла на лінійну залежність від часу, та використовували формулу Айнштайна (14). У таблиці 2 наведено значення коефіцієнтів самодифузії металів, отриманих обома способами при однакових умовах. Значення коефіцієнтів самодифузії, одержаних із СКЗ, є трохи вищими від тих, що були отримані з функцій АКФШ. Загалом, порівнюючи результати нашої роботи з результатами інших авторів, можна зробити висновок, що динамічні властивості відрізняються від тих, що одержані раніше [9, 10]. Коефіцієнти самодифузії, отримані в нашій статті, є більшими, ніж у праці [9]. Таку тенденцію спостерігаємо для всіх порохованих металів. Вона становить для більшості з них відхилення близько $\sim 10\%$, що свідчить про помітний вплив різниці вибору радіуса обрізання міжйонного потенціалу на динаміку йонів металу.

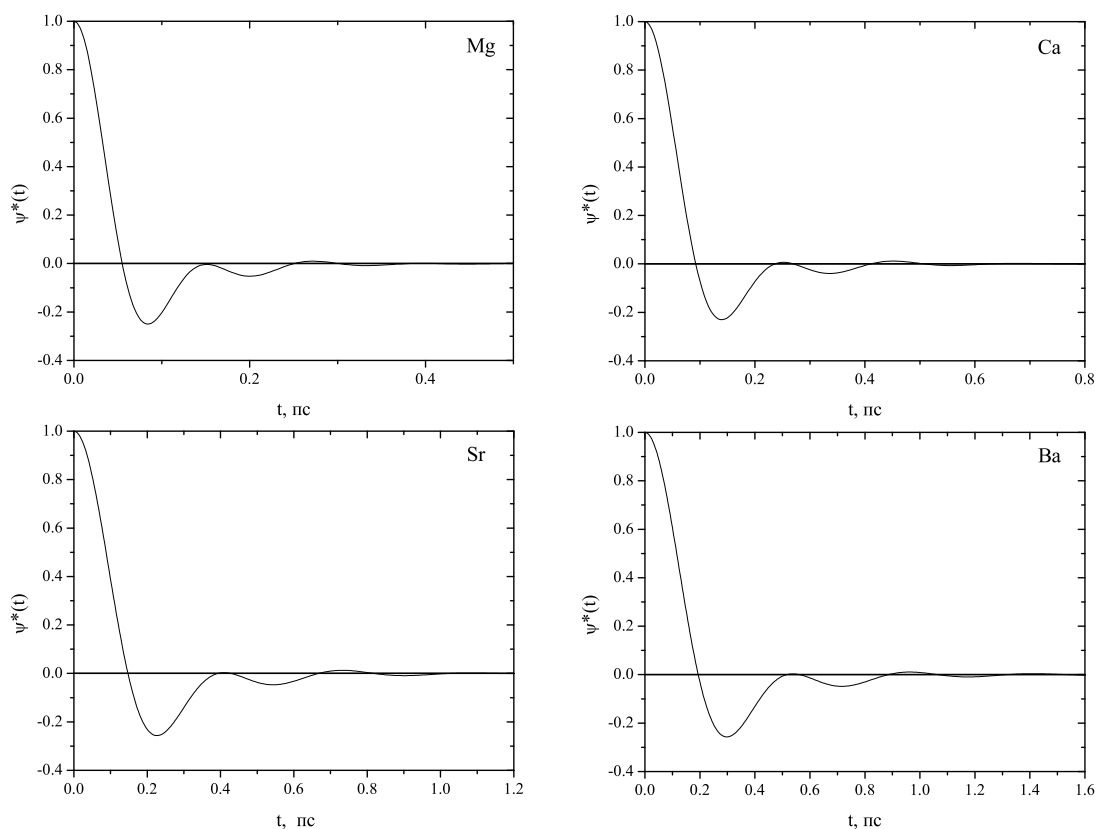


Рис. 1. Нормовані автокореляційні функції швидкостей для лужноземельних металів при умовах, зазначених у таблицях 1 і 2.

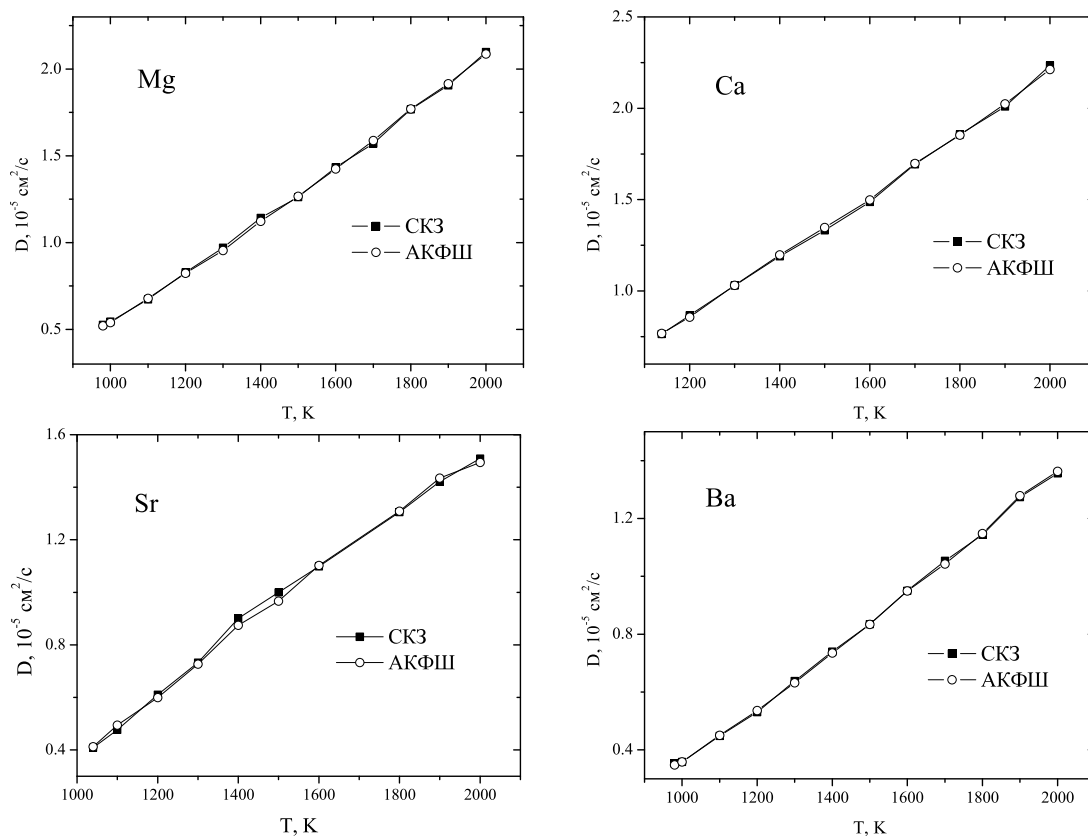


Рис. 2. Температурна залежність коефіцієнтів самодифузії лужноземельних металів.

У таблиці 3 подано результати для в'язкості Mg, Ca, Sr і Ba. Вони дають ліпше узгодження з експериментом, ніж результати, наведені в роботі [10]. Слід зазначити, що процедура розрахунку коефіцієнта в'язкості є надзвичайно часоємкою, оскільки вимагає проведення великої кількості усереднень автокореляційної функції тензора тиску. Коли для розрахунку автокореляційної функції швидкостей можна проводити усереднення і за ансамблем, і за часом, то для автокореляційної функції тензора тиску це усереднення можна здійснювати тільки за часом. Такий підхід автоматично приводить до значного збільшен-

ня часу моделювання (> 1 нс), щоб забезпечити задовільну точність отримуваних результатів.

	η (GPa ps)		
	η	η [10]	η Exp. [10]
Mg	1.10	1.07	1.16
Ca	1.17	1.20	1.20
Sr	1.80	2.10	—
Ba	2.00	2.40	1.74

Таблиця 3. Числові значення коефіцієнта в'язкості для Mg, Ca, Sr і Ba.

-
- [1] C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster, J. M. MacLaren, M. Brajczewska, *Phys. Rev. B* **51**, 14001 (1995).
 [2] J. P. Boon, S. Yip, *Molecular Hydrodynamics* (McGraw-Hill, New York, 1980).
 [3] T. Iida, R. I. L. Guthrie, *The Physical Properties of Liquid Metals* (Oxford Clarendon Press, Oxford, 1993).
 [4] J.-F. Wax, R. Albaki, J.-L. Bretonnet, *Phys. Rev. B* **65**, 014301 (2001).
 [5] D. Chekmarev, M. Zhao, S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **109**, 768 (1998).
 [6] J. N. Herrera, P. T. Cummings, H. Ruiz-Estrada, *Mol. Phys.* **96**, 835 (1999).
 [7] L. E. Gonzalez, D. J. Gonzalez, M. Canales, *Z. Phys. B* **100**, 601 (1996).
 [8] S. Dalgic, M. Colakogullari, S. S. Dalgic, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **7**, 1993 (2005).
 [9] J.-F. Wax, R. Albaki, J.-L. Bretonnet, *Phys. Rev. B* **62**, 14818 (2000).
 [10] M. M. G. Alemany, J. Casas, C. Rey, L. E. Gonzalez, L. J. Gallego, *Phys. Rev. E* **56**, 6818 (1997).
 [11] L. E. Gonzalez, A. Meyer, M. P. Iniguez, D. J. Gonzalez, M. Silbert, *Phys. Rev E* **47**, 4120 (1993).
 [12] У. Харрисон, *Псевдопотенциали в теории металлов* (Мир, Москва, 1968).
 [13] D. S. Chekmarev, D. W. Oxtoby, S. A. Rice, *Phys. Rev. B* **61**, 10116 (2000).
 [14] S. Ichimaru, K. Utsumi, *Phys. Rev. B* **24**, 7385 (1981).
 [15] K. Binder, J. Horbach, W. Kob, W. Paul, F. Varnik, *J. Phys.: Cond. Matt.* **16**, 429 (2004).
 [16] А. Н. Лагарьков, В. М. Сергеев, *Усп. физ. наук* **125**, 409 (1978).
 [17] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation* (Wiley, New York, 1992).
 [18] S. H. Lee, D. K. Park, D. B. Kang, *Bull. Korean Chem. Soc.* **24**, 178 (2003).
 [19] Y. Waseda, *The Structure of Non Crystalline Materials* (McGraw-Hill, New York, 1980).

STRUCTURAL AND DYNAMIC PROPERTIES OF LIQUID ALKALINE-EARTH METALS

P. M. Yakibchuk¹, V. R. Patsahan¹, T. M. Patsahan²

¹*Ivan Franko National University of Lviv,
Department for Metal Physics,*

8, Kyryla i Mefodija St., Lviv, 79005, Ukraine.

²*Institute for Condensed Matter Physics of NAS of Ukraine,*

1 Svientsitskii St., Lviv, 79011, Ukraine

The structural and dynamic properties of liquid alkaline-earth metals near their melting points are studied using the molecular dynamics simulations. To describe the mentioned systems the effective pair potential based on the electron-ionic model potential of Fiolhais [C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster, J. M. MacLaren, M. Brajczewska, *Phys. Rev. B* **51**, 14001 (1995)] is used. The velocity autocorrelation functions and the functions of mean-square displacement are obtained to calculate the self-diffusion coefficients of the liquid metals. The temperature dependencies of the self-diffusion coefficients for Ca, Mg, Sr and Ba are studied. The shear viscosity coefficients of liquid alkaline-earth metals are obtained as well. A comparison of the obtained results with the data calculated by means of other theoretical approaches is performed. Also, the obtained results are in good agreement with experimental data.