

非晶态二元合金模型偏干涉函数的 计算及应用

吴 国 安

(西南反应堆工程研究设计院)

1983年9月23日收到

提 要

本文从计算非晶态材料散射强度的 Debye 方程,推导出非晶态二元合金模型的 Faber-Ziman 偏干涉函数计算公式.利用这些公式,计算了 $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ 和 $\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$ 金属玻璃模型的 $S_{\text{FeB}}(Q)$ 和 $S_{\text{NiB}}(Q)$,并和实验结果及模型计算的偏散射强度 $I_{\text{FeB}}(Q)$ 和 $I_{\text{NiB}}(Q)$ 作了比较.文中还计算了 Hg_2Na 液态合金模型的偏干涉函数,并把它们外推到零衍射角时的数值.最后讨论了具有化学短程序合金的全干涉函数在零衍射角附近的行为.

一、引 言

利用恰当的模型来描述非晶态材料的结构,已经成为研究这种新型材料结构的一种重要的方法.但欲知模型是否正确,必须计算该模型的干涉函数或径向分布函数,并与从实验数据中得到的相应的结果作比较.众所周知,利用 Debye 方程,可以计算模型的全散射强度,最终得到全干涉函数.虽然,通过计算得到的干涉函数在零衍射角时,有一个无穷大的峰值,但从第一峰开始,计算结果和实验结果的比较,仍能较好地衡量模型的适用性.因而,在非晶材料结构研究中,仍被广泛地应用.

但是,要了解和阐述原子的短程结构, Faber-Ziman 偏干涉函数则更为重要.以过渡族金属和类金属组成的二元合金为例: X 射线的全干涉函数主要来自金属原子-金属原子对的偏干涉函数的贡献,含有类金属原子的其它两对偏干涉函数的贡献不大.因而仅从 X 射线全干涉函数及其 Fourier 变换后的径向分布函数,很难判断类金属原子在模型中的位置及与其它原子的配位.在实验上,已通过综合几种不同射线的衍射结果,或综合合金组元不同同位素的中子衍射结果等方法,较精确地测定了某些二元合金的偏干涉函数.如能计算模型的偏干涉函数,并与实验结果作比较,则能较精确地判断模型与实际结构的拟合程度.虽然,把模型各原子对的偏散射强度与实验所得的偏干涉函数作比较的结果已有报道^[1,2],但是,由于这两种函数量纲的不同,这种比较只能是定性的.

本文由 Debye 方程,推导出二元合金模型的 Faber-Ziman 偏干涉函数的计算公式:计算了 FeB 和 NiB 金属玻璃从第一峰开始的模型的偏干涉函数,并与已报道的实验结果作了比较.本文还计算了 Hg_2Na 液态合金简单单元模型的三个偏干涉函数.并从已

知的零衍射角时 Bhatia-Thornton 偏干涉函数值, 计算了这一合金零衍射角时的 Faber-Ziman 偏干涉函数值. 使用外推法, 得到在零衍射角附近的偏干涉函数. 最后把由偏干涉函数得到的全干涉函数和文献报道的结果作了比较, 并讨论了全干涉函数在这一区域内的行为.

二、基本原理

在某衍射角 θ , 由呈非晶态排列的结构单元中原子所散射的强度, 可由 Debye 方程计算^[3]

$$I(Q) = \sum_i \sum_j f_i f_j \sin(Qr_{ij}) / (Qr_{ij}) \quad (\text{电子单位}). \quad (1)$$

式中 f_i 和 f_j 代表了第 i 个和第 j 个原子的原子散射因子, r_{ij} 为这两个原子间的距离, $Q = 4\pi \sin\theta/\lambda$, λ 为入射射线的波长. (1) 式表示了要对单元中所有的原子对做双重求和.

由 m 个 A 原子和 n 个 B 原子所组成的二元结构单元的散射强度, 可以简化成 A 原子和 A 原子、A 原子和 B 原子、B 原子和 A 原子及 B 原子和 B 原子之间的求和. 即

$$I(Q) = I_{AA}(Q) + I_{AB}(Q) + I_{BA}(Q) + I_{BB}(Q). \quad (2)$$

其中

$$\begin{aligned} I_{AA}(Q) &= \sum_{A=1}^m \sum_{A=1}^m f_A f_A \sin(Qr_{AA}) / (Qr_{AA}); \\ I_{AB}(Q) &= \sum_{A=1}^m \sum_{B=1}^n f_A f_B \sin(Qr_{AB}) / (Qr_{AB}); \\ I_{BA}(Q) &= \sum_{B=1}^n \sum_{A=1}^m f_B f_A \sin(Qr_{BA}) / (Qr_{BA}); \\ I_{BB}(Q) &= \sum_{B=1}^n \sum_{B=1}^n f_B f_B \sin(Qr_{BB}) / (Qr_{BB}). \end{aligned} \quad (3)$$

显然, $I_{BA}(Q) = I_{AB}(Q)$. 因而

$$I(Q) = I_{AA}(Q) + 2I_{AB}(Q) + I_{BB}(Q). \quad (4)$$

(3)和(4)式就是计算二元模型偏散射强度和全散射强度的基本公式. 在计算同种原子对 A-A 或 B-B 的偏散射强度时, 若指同一个原子, 则 r_{AA} 或 r_{BB} 为零, 由极限公式可得

$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sin(Qr)}{Qr} = 1$. (3)式中其余各项的双重求和, 在计算机上很容易实现.

由全散射强度, 可以计算出全干涉函数 $S(Q)$

$$S(Q) = \frac{I(Q) - N \cdot [\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2]}{N \cdot \langle f \rangle^2}. \quad (5)$$

式中 $I(Q)$ 为由 N 个原子参加的总散射强度, $N = m + n$, $\langle f^2 \rangle = c_A f_A^2 + c_B f_B^2$, $\langle f \rangle^2 = (c_A f_A + c_B f_B)^2$, 其中 $c_A = \frac{m}{m+n}$, $c_B = \frac{n}{m+n}$ 各为 A, B 原子的浓度, 劳厄单调漫

散射为

$$\langle f' \rangle - \langle f \rangle^2 = c_A c_B (f_A - f_B)^2. \quad (6)$$

把(4)式和(6)式代入(5)式,则有

$$S(Q) = \frac{I_{AA}(Q) + 2I_{AB}(Q) + I_{BB}(Q) - N \cdot c_A c_B (f_A - f_B)^2}{N \cdot \langle f \rangle^2}. \quad (7)$$

众所周知,二元非晶态合金的全干涉函数和 Faber-Ziman 偏干涉函数的关系为

$$S(Q) = W_{AA} S_{AA}(Q) + W_{AB} S_{AB}(Q) + W_{BB} S_{BB}(Q). \quad (8)$$

式中权重因子 $W_{AA} = c_A^2 f_A^2 / \langle f \rangle^2$, $W_{AB} = 2c_A c_B f_A f_B / \langle f \rangle^2$, $W_{BB} = c_B^2 f_B^2 / \langle f \rangle^2$; $S_{AA}(Q)$, $S_{AB}(Q)$ 和 $S_{BB}(Q)$ 为 Faber-Ziman 偏干涉函数. 比较(7)和(8)式,则有

$$\begin{aligned} W_{AA} S_{AA}(Q) &= \frac{I_{AA}(Q) - N c_A c_B f_A^2}{N \langle f \rangle^2}, \\ W_{AB} S_{AB}(Q) &= \frac{2I_{AB}(Q) - 2N c_A c_B f_A f_B}{N \langle f \rangle^2}, \\ W_{BB} S_{BB}(Q) &= \frac{I_{BB}(Q) - N c_A c_B f_B^2}{N \langle f \rangle^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

把 W_{AA} , W_{AB} 和 W_{BB} 分别代入(9)式,最终得到

$$\begin{aligned} S_{AA}(Q) &= \frac{I_{AA}(Q)}{N c_A^2 f_A^2} - \frac{c_B}{c_A}, \\ S_{AB}(Q) &= \frac{I_{AB}(Q)}{N c_A c_B f_A f_B} + 1, \\ S_{BB}(Q) &= \frac{I_{BB}(Q)}{N c_B^2 f_B^2} - \frac{c_A}{c_B}. \end{aligned} \quad (10)$$

利用方程(10),即可以计算二元合金模型的偏干涉函数.

众所周知,非晶合金的偏干涉函数反映了原子对间原子排列的特征,与测量方法和所用的人射射线无关. 因此,上述的推导过程适用于各种入射束. 如入射束为中子,方程(10)中 $I_{AA}(Q)$, $I_{AB}(Q)$ 和 $I_{BB}(Q)$ 代表了中子的偏散射强度, f_A 和 f_B 则代表了组元原子的中子散射长度. 需要指出的是: 由于中子散射长度是常数值,因而使用中子衍射法计算二元合金模型的偏干涉函数更为方便.

三、简单单元模型的偏干涉函数计算

1. 过渡族金属-类金属模型

本文计算了 $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ 和 $\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$ 模型的偏干涉函数 $S_{\text{FeB}}(Q)$ 和 $S_{\text{NiB}}(Q)$. 模型的构型是 Gaskell 提出的局域配位模型 (local coordination model). 在文献[1]和[2]中,曾对实验的 $S_{\text{FeB}}(Q)$ 和 $S_{\text{NiB}}(Q)$ 与模型的中子偏散射强度 $I_{\text{FeB}}(Q)$ 和 $I_{\text{NiB}}(Q)$ 作了定性比较.

图 1 和图 2 则是模型计算的与上述实验的偏干涉函数比较. 由于模型是由几个原子组成的简单结构单元,在峰高和峰宽等方面受到了影响,但仍然和实验结果相当一致. 表 1 比较了模型和实验结果的峰值位置,表中还列出了相应的中子偏散射强度的峰值位置.

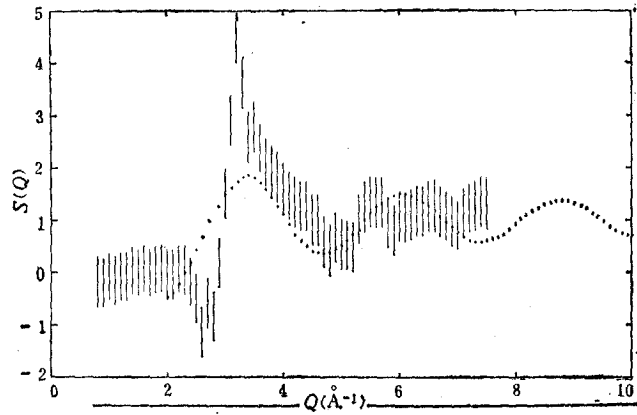


图1 $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ 金属玻璃模型计算与实验偏干涉函数 $S_{\text{FeB}}(Q)$ 的比较
 线段为文献[1]中实验结果; ●为模型计算结果

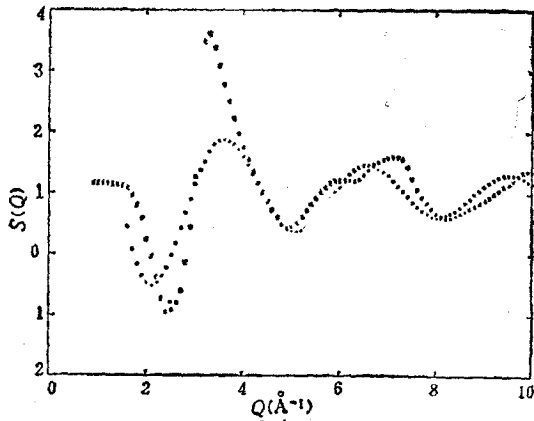


图2 $\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$ 金属玻璃模型计算与实验
 偏干涉函数 $S_{\text{NiB}}(Q)$ 的比较
 ×为文献[2]中实验结果; ●为模型计算结果

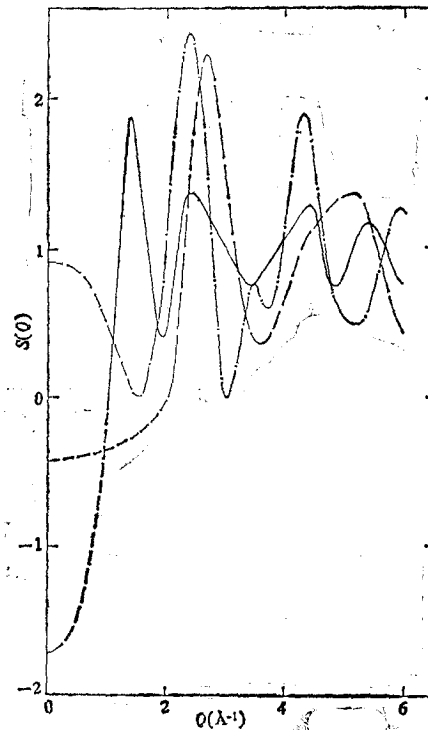


图3 Hg_2Na 液态合金模型计算的三个偏干涉函数
 ——为 $S_{\text{NaNa}}(Q)$; —●为 $S_{\text{HgNa}}(Q)$;
 - -为 $S_{\text{HgHg}}(Q)$; ---为外推部份

2. 金属-金属模型

图3所示为 Hg_2Na 液态合金模型计算的三个偏干涉函数 $S_{\text{HgHg}}(Q)$, $S_{\text{HgNa}}(Q)$ 和 $S_{\text{NaNa}}(Q)$. 对于 Hg-Na 二元系液态合金, Tamaki 等人^[4]和 Ishiguro 等人^[5]作过较系统的研究,并指出了这系列合金的化合物成形趋势. 因而本文使用了晶态的 Hg_2Na 简单单

表1 $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ 和 $\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$ 金属玻璃模型计算和实验偏干涉函数的峰值位置

合金	干涉函数	Q_1	Q_2	Q_3	文献
	$S_{\text{FeB}}(Q)$ 实验	3.3	—	—	[1]
$\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$	$S_{\text{FeB}}(Q)$ 模型	3.3	6.0	8.7	本文
	$I_{\text{FeB}}(Q)$ 模型 (偏散射强度)	3.3	6.0	8.7	[1]
	$S_{\text{NiB}}(Q)$ 实验	3.3	Q_{21} Q_{22} 5.9 6.9	10.0	[2]
$\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$	$S_{\text{NiB}}(Q)$ 模型	3.6	6.5	9.5	本文
	$I_{\text{NiB}}(Q)$ 模型 (偏散射强度)	3.6	6.5	9.5	[2]

元, $\text{C}_{32}\text{AlB}_2$ 型结构, 作为液态 Hg_2Na 合金的结构模型。由图 3 可见, $S_{\text{HgHg}}(Q)$ 和 $S_{\text{HgNa}}(Q)$ 峰值位置和文献[4]中的实验结果一致(见表 2)。只是模型计算结果的第二峰全都分裂成两个次峰。文献[4]使用了三个 HgNa 合金的实验全干涉函数, 推算出三个偏干涉函数。但从表 3 所见的权重因子来看, $S_{\text{HgHg}}(Q)$ 和 $S_{\text{HgNa}}(Q)$ 对全干涉函数贡献的总和已几乎等于全干涉函数。因而, 由模型计算和实验结果的 $S_{\text{HgHg}}(Q)$ 和 $S_{\text{HgNa}}(Q)$ 的拟合, 可知这一结构单元粗略地近似于 Hg_2Na 液态合金的原子短程结构。

表2 Hg_2Na 液态合金模型计算和实验偏干涉函数的峰值位置

干涉函数	Q_1	Q_2	文献
$S_{\text{HgHg}}(Q)$ 实验	2.50	4.6	[4]
$S_{\text{HgHg}}(Q)$ 模型	2.6	5.0	本文
$S_{\text{HgNa}}(Q)$ 实验	2.4	4.5	[4]
$S_{\text{HgNa}}(Q)$ 模型	2.4	4.4	本文
$S(Q)$ 实验	2.5	4.5	[4]中 $\text{Hg}_{50}\text{Na}_{50}$ 及 $\text{Hg}_{80}\text{Na}_{20}$
$S(Q)$ 模型	2.6	Q_{21} Q_{22} 4.5 5.2	本文

表3 几种 Hg-Na 液态合金偏干涉函数的 X 射线权重因子 ($Q=0$)

合金	W_{HgHg}	W_{HgNa}	W_{NaNa}
$\text{Hg}_{94}\text{Na}_6^*$	0.9827	0.0172	0.0001
$\text{Hg}_{90}\text{Na}_{10}^*$	0.9701	0.0296	0.0002
$\text{Hg}_{80}\text{Na}_{20}^*$	0.9346	0.0643	0.0011
Hg_2Na	0.8770	0.1189	0.0041

* 文献[4]中用于计算偏干涉函数。

四、讨 论

利用方程 (10) 对几种简单模型的计算结果表明: 所有的偏干涉函数在大 Q 值范围内, 都由振荡逐步收敛至 1. 这与偏干涉函数的性质和规律^[6,7]相符合. 另一方面, 方程 (10) 表明, 从偏散射强度到偏干涉函数的计算, 只引进了常数项, 这在中子衍射方法计算时更明显. 因而偏干涉函数的峰值和谷值的位置不变, 但在峰宽及各峰间的比例等方面都有了定量的依据.

文献[5]利用已知热力学参数, 建立了对 Na-Hg 二元系液态合金, Bhatia-Thornton 所定义的偏干涉函数在零衍射角时的数值—— $S_{NN}(0)$, $S_{NC}(0)$ 和 $S_{CC}(0)$ 与 Hg, Na 浓度的关系. 事实上, 可以通过如下的 Faber-Ziman 偏干涉函数和 Bhatia-Thornton 偏干涉函数的关系:

$$\begin{aligned} S_{AA}(Q) &= S_{NN}(Q) + \frac{1}{c_A^2} S_{CC}(Q) + \frac{2}{c_A} S_{NC}(Q) - \frac{c_B}{c_A}, \\ S_{AB}(Q) &= S_{NN}(Q) - \frac{1}{c_A c_B} S_{CC}(Q) + \left(\frac{1}{c_A} - \frac{1}{c_B} \right) S_{NC}(Q) + 1, \\ S_{BB}(Q) &= S_{NN}(Q) + \frac{1}{c_B^2} S_{CC}(Q) - \frac{2}{c_B} S_{NC}(Q) - \frac{c_A}{c_B}, \end{aligned} \quad (11)$$

计算 Faber-Ziman 偏干涉函数在零衍射角时的数值—— $S_{AA}(0)$, $S_{AB}(0)$ 和 $S_{BB}(0)$.

文献[5]中 Hg_2Na 合金的 $S_{NN} = 0.023$, $S_{NC}(0) = -0.003$, $S_{CC}(0) = 0.026$, 得到 $S_{\text{HgHg}}(0) = -0.428$, $S_{\text{HgNa}}(0) = 0.91$, $S_{\text{NaNa}}(0) = -1.725$. 根据已报道的金属玻璃偏干涉函数实验曲线的形式, 利用指数曲线, 把图 3 中 $S_{\text{HgHg}}(Q)$, $S_{\text{HgNa}}(Q)$ 和 $S_{\text{NaNa}}(Q)$ 曲线外推到 $Q = 0$ 时的三个偏干涉函数的数值, 如图 3 中虚线所示, 从而得到了在 $Q = 6 \text{ \AA}^{-1}$ 以内的三个偏干涉函数. 图 4 是通过三个偏干涉函数权重相加, 得到的 X 射线全干涉函数 $S(Q)$. 从图 4 可见, 虽然模型计算曲线的第二峰分裂成两个次峰, 表现了金

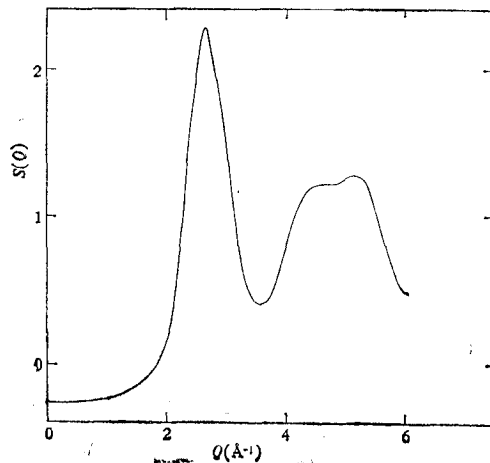


图 4 Hg_2Na 液态合金模型计算的 X 射线全干涉函数

属玻璃的特点,而实验曲线中 $\text{Hg}_{50}\text{Na}_{50}$ 及 $\text{Hg}_{80}\text{Na}_{20}$ 的第二峰表明了液态合金的特点,但是, $S(Q)$ 的形状及峰值位置和文献[4]中结果是一致的(见表2),差别仅在于 Q 值从 0 到 1.8 \AA^{-1} 范围内,模型计算曲线为负值。

对于二元合金,从实验所得的衍射强度,经过数据处理后所得的全干涉函数,在小 Q 值范围内为负值这一现象,文献已有报道,如 $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ X 射线衍射的全干涉函数^[8], $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$, $\text{Co}_{81.5}\text{B}_{18.5}$ X 射线衍射的全干涉函数^[9]以及三种同位素镍 ^{58}Ni , ^{60}Ni 和 ^{64}Ni 的 $\text{Ni}_{64}\text{B}_{36}$ 中子衍射的全干涉函数^[10]。事实上,在不同的研究场合,有不同定义的全干涉函数。Bhatia-Thornton 定义的 X 射线全干涉函数 $S^{\text{BT}}(Q) = \frac{I_a(Q)}{\langle f^2 \rangle}$, 式中 $I_a(Q)$ 为每个原子的散射强度。而 Faber-Ziman 定义的 X 射线全干涉函数 $S^{\text{FZ}}(Q) = \frac{I_a(Q) - [\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2]}{\langle f \rangle^2}$ 。显然 $S^{\text{BT}}(Q) \geq 0$ 。而对于某些合金,当劳厄散射强度 $c_A c_B (f_A - f_B)^2$ 大于散射强度 $I_a(Q)$ 时, $S^{\text{FZ}}(Q)$ 为负值。Dini 等人指出^[8]: 对于含有 20% 左右类金属原子的过渡族金属-类金属一类合金, $S(Q)$ 的负值可达 -0.15。这一点也可以从 $S^{\text{FZ}}(Q)$ 定义中 $\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{\langle f \rangle^2}$ 项预测。在 $Q = 0$ 时, $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ 的为 0.124, Hg_2Na 的可达 0.325。因而 Hg_2Na 的 $S^{\text{FZ}}(0)$ 应为负值,且数值不超过 -0.325。这一结论与模型计算中 $S^{\text{FZ}}(0) = -0.273$ 相一致。

$S^{\text{FZ}}(Q)$ 为负值的范围,应由合金的化学短程序所决定。众所周知,完全无序化结构合金的 X 射线劳厄散射强度 $c_A c_B (f_A - f_B)^2$ 是随 Q 值而递减的,而有序化结构合金的劳厄散射强度振荡并收敛于 $c_A c_B (f_A - f_B)^2$ 。Blétry^[11] 的理论计算表明,这种振荡在 $Q = 2 \text{ \AA}^{-1}$ 附近出现一个峰值。因而使某些合金的 $S(Q)$ 为负值的区域扩大到 $Q = 2 \text{ \AA}^{-1}$ 附近。这与文献[8],[9]和[10]的实验结果相一致。文献[5]中 Hg_2Na 液态合金 $S_{\text{CC}}(0)$ 的实验值为 0.026, 远远偏离完全无序化结构时的数值 0.222。从而表明了这一合金的化学短程序有序性。因而在模型计算中, $Q < 2 \text{ \AA}^{-1}$ 范围内 $S(Q)$ 为负值与理论推导是一致的。

五、结 论

本文从计算非晶态材料散射强度的 Debye 方程出发,推导出二元合金结构模型的 Faber-Ziman 偏干涉函数的计算公式。从一些简单模型的计算结果表明:

1. 模型计算的偏干涉函数可以直接与实验结果作比较,这对金属玻璃结构的研究,特别是过渡族金属-类金属金属玻璃结构的研究,提供了一个更有效的办法。

2. Hg_2Na 液态合金的全干涉函数 $S^{\text{FZ}}(Q)$ 在 $Q < 2 \text{ \AA}^{-1}$ 范围内为负值。与一些合金的实验结果相一致,并与从理论上的推论相吻合。

用 Debye 方程计算模型的散射强度,然后得到全干涉函数。但由于不知道 $S(0)$ 值,因而不能估计在 $Q = 0$ 附近的 $S(Q)$ 曲线的行为。所以在文献中^[12],表达模型计算的 $S(Q)$ 时,或保留在 $Q = 0$ 附近的一个无穷大峰,或舍去这个峰。我们的研究表明:若已知 $S_{\text{NN}}(0)$, $S_{\text{NC}}(0)$ 和 $S_{\text{CC}}(0)$, 则可以把 Faber-Ziman 偏干涉函数外推到 $Q = 0$ 时的

数值,最终得到在 $Q = 0$ 附近的全干涉函数.

由于实验工作的困难,确定 $Q = 0$ 附近的全干涉函数是不容易的. 但是,这一区域内的全干涉函数对研究合金的势函数、化学短程序及原子尺寸影响因素等方面,都有着极其重要的作用. 精确地研究小 Q 值范围内的 $S(Q)$ 函数是极为必要的. 不能简单地认为 $S(Q) > 0$. 因而,除了精确的实验、统一的计算方法及定义明确的实验结果报道,如全干涉函数是 $S^{BT}(Q)$ 或是 $S^{FZ}(Q)$, 在有条件的情况下,模型计算也是十分必要的.

参 考 文 献

- [1] Wu Guoan (吴国安), N. Cowlam, H. A. Davies, R. A. Cowley, D. Mck. Paul and W. G. Stirling, *Journal De Physique, Coll.*, C7 (1982), 71.
- [2] 吴国安,物理学报, **33**(1984), 645.
- [3] P. Debye, *Ann. Phys.*, **46** (1915), 809.
- [4] S. Tamaki, Y. Waseda, S. Takeda and Y. Tsuchiya, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **12** (1982), 1101.
- [5] T. Ishiguro, S. Takeda and S. Tamaki, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **12** (1982), 845.
- [6] T. E. Faber and J. M. Ziman, *Phil. Mag.*, **11** (1965), 153.
- [7] F. Fukunaga and K. Suzuki, *Sci. Rep. RITU*, **28A** (1980), 208.
- [8] K. Dini, N. Cowlam and H. A. Davies, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **12** (1982), 1553.
- [9] N. Cowlam, Wu Guoan (吴国安) and H. A. Davies, Annual Report, ILL (1982), France.
- [10] P. Lamparter, E. Nold, G. Rainer-Harbach, E. Grallath and S. Steeb, *Z. Naturf.*, **36a** (1981), 165.
- [11] J. Blètry, *Z. Naturf.*, **33a** (1978), 327.
- [12] G. S. Cargill III, *Sol. state Phys.*, **30** (1975), 227.

ON CALCULATION AND APPLICATION OF PARTIAL STRUCTURE FACTORS FOR MODELS OF AMORPHOUS BINARY ALLOYS

WU GUO-AN

(Institute for Reactor Engineering Research and Design, Chengdu)

ABSTRACT

The equation of calculating Faber-Ziman partial structure factors for models of binary alloys is derived from Debye equation. The $S_{FeB}(Q)$ and $S_{NiB}(Q)$ of models for $Fe_{83}B_{17}$ and $Ni_{64}B_{36}$ metallic glasses are calculated, and compared with the experimental results and the partial scattering intensities $I_{FeB}(Q)$ and $I_{NiB}(Q)$. The partial structure factors of model for Hg_2Na liquid alloy are also calculated, and extrapolated to the long wavelength limit. Finally, the behavior of the total structure factors near the long wavelength limit for alloys, which have chemical short range order, is discussed.