

Mn-Fe-C 熔体活度相互作用系数

陈二保，董元篪，郭上型

(安徽工业大学冶金与材料学院，安徽 马鞍山 243002)

摘要：实验测定了不同温度 Mn-Fe-C 熔体中 C 的溶解度，目的在于获得 Mn-Fe-C 熔体活度相互作用系数，用新的方法处理实验数据。通过热力学推导和计算，获得了 Mn-Fe-C 熔体某些重要热力学性质与温度($1350^{\circ}\text{C} \leq T - 273 \leq 1450^{\circ}\text{C}$)的关系式。

关键词：Mn-Fe-C 熔体；活度相互作用系数；热力学性质；线性回归；温度

中图分类号：TF762.8 文献标识码：A 文章编号：1009-606X(2003)04-0335-05

1 前言

Mn-Fe-C 熔体热力学性质的研究对高炉 Mn-Fe 合金熔体脱 Si 脱 P^[1-3]的理论研究和工业生产具有重要的意义。与 Fe 基体系不同，Mn 基体系的热力学数据十分缺乏。文献[4,5]分别测定了 1400°C 温度下 Mn-Fe-C 熔体富 Mn 端和富 Fe 端 C 的溶解度；陈二保等^[6]研究了 1400°C 温度下 Mn-Fe-C 熔体的热力学性质。本文实验测定了不同温度时 Mn-Fe-C 熔体($X_{\text{Mn}}=0.161\sim0.706$, $X_{\text{Fe}}=0.034\sim0.623$)内 C 的溶解度，结合文献[6]的实验数据，通过热力学推导和计算，获得了 Mn-Fe-C 熔体热力学性质和温度的关系式，对它们相互间的一致性作了计算检验。

2 实验

C 溶解度平衡实验在 N₂ 保护的 MoSi₂ 电阻炉内进行。用四孔石墨坩埚盛放 8 g 一定质量比的电解 Mn(Mn>99.97%, ω) 和纯 Fe(Fe>99.977%, ω)。双铂铑热电偶测温，标准双铂铑热电偶校温，DWK 温度自动控制仪控温，实验温度为 1350, 1375, 1425°C 和 1450°C，温度波动范围不超过±2°C。C 溶解平衡时间为 4.5, 4.5, 4 和 4 h(自 Mn, Fe 完全熔化开始计时)。

不同 Mn, Fe 质量比的 Mn-Fe 合金熔体中 C 溶解平衡实验结果列于表 1。

表 1 C 溶解平衡实验结果
Table 1 Results of C solubility equilibrium experiments

No.	1350°C			1375°C			1425°C			1450°C		
	X_{C}	X_{Mn}	X_{Fe}									
1	0.259	0.706	0.035	0.268	0.697	0.035	0.271	0.693	0.036	0.275	0.691	0.034
2	0.254	0.678	0.068	0.260	0.669	0.071	0.264	0.664	0.072	0.272	0.659	0.069
3	0.252	0.643	0.105	0.257	0.635	0.108	0.260	0.630	0.110	0.269	0.627	0.104
4	0.249	0.615	0.136	0.255	0.601	0.144	0.257	0.595	0.148	0.266	0.595	0.139
5	0.246	0.578	0.176	0.253	0.566	0.181	0.256	0.560	0.184	0.263	0.562	0.175
6	0.245	0.493	0.262	0.246	0.536	0.218	0.250	0.528	0.222	0.259	0.531	0.210
7	0.244	0.460	0.296	0.244	0.502	0.254	0.245	0.495	0.260	0.255	0.499	0.246
8	0.234	0.427	0.339	0.240	0.466	0.294	0.242	0.457	0.301	0.252	0.464	0.284
9	0.230	0.381	0.389	0.236	0.432	0.332	0.244	0.419	0.337	0.249	0.430	0.321
10	0.224	0.351	0.425	0.231	0.391	0.378	0.238	0.378	0.384	0.245	0.391	0.364
11	0.215	0.314	0.471	0.228	0.362	0.410	0.232	0.349	0.419	0.242	0.362	0.396
12	0.211	0.251	0.538	0.225	0.323	0.452	0.229	0.310	0.461	0.237	0.327	0.436
13	0.207	0.190	0.603	0.221	0.287	0.492	0.222	0.274	0.504	0.234	0.290	0.476
14	0.204	0.180	0.616	0.217	0.250	0.533	0.217	0.237	0.546	0.229	0.256	0.515
15				0.211	0.214	0.575	0.215	0.198	0.587	0.225	0.220	0.555
16				0.205	0.178	0.617	0.206	0.161	0.633	0.216	0.186	0.598

收稿日期：2003-01-21，修回日期：2003-04-21

基金项目：国家自然科学基金资助项目(编号：59774015)

作者简介：陈二保(1945-)，男，江苏省镇江市人，硕士，教授，研究方向为冶金物理化学。

3 计算与讨论

3.1 Mn-Fe-C 熔体中 C 的溶解度

表 1 中的 C 溶解度 X_C 对 X_{Mn} 的线性回归方程分别是：

$$1350^\circ\text{C}: \quad X_C = 0.1832 + 0.1107X_{Mn} \quad (r=0.98), \quad (1)$$

$$1375^\circ\text{C}: \quad X_C = 0.1876 + 0.1120X_{Mn} \quad (r=0.98), \quad (2)$$

$$1425^\circ\text{C}: \quad X_C = 0.1927 + 0.1112X_{Mn} \quad (r=0.99), \quad (3)$$

$$1450^\circ\text{C}: \quad X_C = 0.2005 + 0.1101X_{Mn} \quad (r=0.99), \quad (4)$$

$$1400^\circ\text{C}: \quad X_C = 0.1886 + 0.1119X_{Mn} \quad (r=0.914)^{[6]}. \quad (5)$$

令式(1)~(5)中 $X_{Mn}=0$ ，得到 Fe-C 系中 C 的溶解度 $X_{Fe,C}^b$ (见表 2)。将 $X_{Mn}=1-X_C-X_{Fe}$ 代入式(1)~(5)，得到相应温度时 C 溶解度 X_C 与 X_{Fe} 的关系式：

$$X_C = 0.2646 - 0.0997X_{Fe}, \quad (6)$$

$$X_C = 0.2694 - 0.1007X_{Fe}, \quad (7)$$

$$X_C = 0.2735 - 0.1001X_{Fe}, \quad (8)$$

$$X_C = 0.2798 - 0.0992X_{Fe}, \quad (9)$$

$$X_C = 0.2703 - 0.1006X_{Fe}. \quad (10)$$

令式(6)~(10)中 $X_{Fe}=0$ ，则得到 Mn-C 系中 C 的溶解度 $X_{Mn,C}^b$ (见表 3)。

3.2 热力学性质的求值

3.2.1 Fe-C 系和 Fe-Mn-C 系热力学性质求值

式(1)~(10)可写成如下通式：

$$X_C = a + bX_j, \quad (11)$$

$$\delta_C^j = -b/a^{[6]} \quad (12)$$

Fe-Mn-C 系 δ_C^{Mn} 和 Mn-Fe-C 的 δ_C^{Fe} 值分别见表 2, 3。

Wagner 公式用于 C 饱和的 Fe-C 二元系：

$$\ln \gamma_C = -\ln X_{Fe,C}^b = \ln \gamma_C^0 + \varepsilon_C^C X_{Fe,C}^b, \quad (13) \quad \gamma_C^0 = \gamma_C / f_C^{[8]}.$$

由 Fe-Mn-C 系 $\lg f_C$ 的计算式(只考虑一阶活度相互作用系数)和式(14)，整理后得到：

$$-\lg(X_C \gamma_C^0) / [\%C] = e_C^C + e_C^{Mn} [\%Mn] / [\%C]. \quad (15)$$

令 $Y = -\lg(X_C \gamma_C^0) / [\%C]$ ， $X = [\%Mn] / [\%C]$ ，取 $X_{Mn}=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ 和 0.7 ，分别代入式(1)~(5)计算 X_C 。将 X_C 和 X_{Mn} 换算成 [%C] 和 [%Mn]。设定 1 个 ε_C^C 值，由式(13)计算出 γ_C^0 ，于是计算出 Y ， Y 对 X 线性回归得：

$$Y = e_C^C + e_C^{Mn} X, \quad (16) \quad \varepsilon_i^j = 230 \frac{M_j}{M_1} e_i^j + \frac{M_1 - M_j}{M_1} [7], \quad (17) \quad e_C^C = 358/T^{[9]}. \quad (18)$$

用迭代法求出 Fe-C 系和 Fe-Mn-C 系的 $\ln \gamma_C^0$, γ_C^0 , e_C^C , ε_C^C 和 e_C^{Mn} 值，见表 2。

式(14)和(17)成立的条件是稀溶液，对 C 而言，就是 $X_C = X_C^0 [\%C]$ 成立的溶液， X_C^0 为 Fe-C 系 C 浓度为 1%(ω)对应的 X_C 。Mn 与 Fe 的原子摩尔质量几乎相同，故对 Fe-Mn-C 系，Mn 的浓度改变不会影响线性关系的成立。本研究 C 是饱和状态， X_C 与 [%C] 的关系偏离线性。本实验测得的 X_C 的最大值为 0.275([\%C]=7.64)，取 X_C^0 为 0.04，偏离线性关系的最大相对误差的绝对值为 10.0%。该值作为迭代成功的标志，即迭代最终得到的 e_C^C 值对由式(18)计算得到的 e_C^C 值的相对误差绝对值必须不大于 10.0%。具体迭代运算略。

不考虑二阶活度相互作用系数，则：

$$\delta_C^i = \varepsilon_C^j / (1 + \varepsilon_C^C X_C^b)^{[10]}. \quad (19)$$

不同温度 Fe-Mn-C 系的 ε_C^{Mn} 值见表 2.

表 2 不同温度时 Fe-C 系和 Fe-Mn-C 系热力学性质

Table 2 Thermodynamical properties in Fe-C system and Fe-Mn-C system at different temperatures

T (°C)	$X_{Fe,C}^b$	$\ln \gamma_C^0$	γ_C^0	ε_C^C	e_C^C	δ_C^{Mn}	ε_C^{Mn}	$e_C^{Mn} \times 10^3$	$X_{Fe,C}^{b,exp}$ [7]
1350	0.1832	-0.1070	0.8985	9.848	0.1685	-0.6043	-1.695	-6.623	0.1905
1375	0.1876	-0.1658	0.8472	9.804	0.1671	-0.5969	-1.695	-6.601	0.1928
1400	0.1886	-0.1762	0.8384	9.779	0.1665	-0.5933	-1.688	-6.564	0.1951
1425	0.1927	-0.2264	0.7974	9.720	0.1650	-0.5771	-1.658	-6.468	0.1973
1450	0.2005	-0.3241	0.7232	9.631	0.1625	-0.5491	-1.609	-6.313	0.1995

由表 2 中得到 1450°C 时 Fe-Mn-C 系的 $\ln \gamma_C$ 的 Wagner 式为

$$\ln \gamma_C = -0.3241 + 9.631X_C - 1.609X_{Mn}. \quad (20)$$

误差计算表明，上式能用于计算从纯 Mn 到纯 Fe 浓度范围内 Mn-Fe-C 熔体中 C 饱和时的 $\ln \gamma_C$.

3.2.2 Mn-C 系和 Mn-Fe-C 系的热力学性质

Wagner 公式严格成立的条件是极稀溶液。因此，当 $X_{Fe} \rightarrow 0, X_C \rightarrow 0, X_{Mn} \rightarrow 1$ 时，式(20)也成立。根据 γ_C^0 的物理意义之一^[8]，这时 $\ln \gamma_C \rightarrow \ln \gamma_C^0$ (Mn-C 二元系)。Mn-C 系的 $\ln \gamma_C^0$ 和 γ_C^0 值见表 3。类似地计算得到 Mn-C 系和 Mn-Fe-C 的 $\varepsilon_C^C, \varepsilon_C^{Fe}, e_C^C$ 和 e_C^{Fe} 值，见表 3。

利用 Mn-C 系的 γ_C^0 和 X_C^0 ，计算出 Mn-C 系 C 的标准溶解 Gibbs 自由能 $\Delta \bar{G}_C^0$ 的值，见表 3。

表 3 不同温度 Mn-C 系和 Mn-Fe-C 系的热力学性质

Table 3 Thermodynamical properties in Mn-C system and Mn-Fe-C system at different temperatures

T (°C)	$X_{Mn,C}^b$	$\ln \gamma_C^0$	γ_C^0	ε_C^C	e_C^C	δ_C^{Fe}	ε_C^{Fe}	$e_C^{Fe} \times 10^3$	$\Delta \bar{G}_C^0$ (J/mol)
1350	0.2646	-1.802	0.1650	11.83	0.1855	0.3768	1.557	6.901	-66400
1375	0.2694	-1.861	0.1556	11.77	0.1838	0.3738	1.560	6.906	-68230
1400	0.2703	-1.864	0.1551	11.74	0.1829	0.3722	1.553	6.874	-69310
1425	0.2735	-1.884	0.1519	11.63	0.1807	0.3660	1.530	6.779	-70640
1450	0.2798	-1.934	0.1446	11.46	0.1771	0.3545	1.491	6.592	-72380

3.3 热力学性质与温度的关系

3.3.1 Fe-C 系和 Fe-Mn-C 系热力学性质和温度的关系

表 2 中 $\lg X_{Fe,C}^b, \ln \gamma_C^0, \varepsilon_C^C, e_C^C, \delta_C^{Mn}, \varepsilon_C^{Mn}$ 和 e_C^{Mn} 对 T^{-1} 的线性回归方程分别为

$$\lg X_{Fe,C}^b = -1283/T + 5.043 \times 10^{-2} \quad (r=-0.97), \quad (21)$$

$$\ln \gamma_C^0 = 5515/T - 3.498 \quad (r=-0.96), \quad (22)$$

$$\varepsilon_C^C = 5796/T + 6.290 \quad (r=0.97), \quad (23)$$

$$\varepsilon_C^{Fe} = 157.6/T + 7.172 \times 10^{-2} \quad (r=0.97), \quad (24)$$

$$\delta_C^{Mn} = -1447/T + 0.2813 \quad (r=-0.93), \quad (25)$$

$$\varepsilon_C^{Mn} = -2301/T - 0.2930 \quad (r=-0.89), \quad (26)$$

$$e_C^{Mn} = -7.779/T - 1.848 \times 10^{-3} \quad (r=-0.93), \quad (27)$$

$$e_C^{Mn} = -300/T + 0.154 \quad (r=0.92), \quad (28)$$

由式(21)计算出 1400°C 时 Fe-C 系的 $X_{Fe,C}^b$ 为 0.1921，该值对报道值 0.1951^[11] 的相对误差为 -1.54%。1600°C 时，由式(27)计算出的 e_C^{Mn} 值对由式(28)计算出的 e_C^{Mn} 值的相对误差为 2.75%。

由式(22)和 Fe-C 系的 X_C^0 得到：

$$\Delta\bar{G}_{\text{Fe,C}}^0 = 45850 - 55.84T \quad (\text{J/mol}). \quad (29)$$

$$\Delta\bar{G}_{\text{Fe,C}}^0 = 22590 - 42.26T \quad (\text{J/mol})^{[7]}. \quad (30)$$

在 1300~1700°C 温度范围内, 式(29)计算值对由式(30)计算值的相对误差绝对值最大为 5.81%。式(1)~(5)斜率平均值为 0.1112。由式(21)得 $X_{\text{Fe,C}}^b = 1.123e^{-2955/T}$, 于是 Mn-Fe-C 熔体 C 溶解度 X_C 与 T 和 X_{Mn} 的关系式为

$$X_C = 1.123e^{-2955/T} + 0.1112X_{\text{Mn}}. \quad (31)$$

3.3.2 Mn-C 系和 Mn-Fe-C 系热力学性质和温度的关系

表 3 中的 $\lg X_{\text{Mn,C}}^b$, $\ln \gamma_C^0$, ε_C^C , e_C^C , $\varepsilon_C^{\text{Fe}}$, e_C^{Fe} 对 T^{-1} 的线性回归方程为

$$\lg X_{\text{Mn,C}}^b = -613.8/T - 0.1992 \quad (r=-0.97), \quad (32)$$

$$\ln \gamma_C^0 = 3214/T - 3.791 \quad (r=-0.96), \quad (33)$$

$$\varepsilon_C^C = 9883/T + 5.777 \quad (r=0.97), \quad (34)$$

$$\varepsilon_C^C = 221.8/T + 4.939 \times 10^{-2} \quad (r=0.97), \quad (35)$$

$$\varepsilon_C^{\text{Fe}} = 582.5/T + 2.037 \times 10^{-2} \quad (r=-0.93), \quad (36)$$

$$\varepsilon_C^{\text{Fe}} = 1776/T + 0.4760 \quad (r=-0.88), \quad (37)$$

$$e_C^{\text{Fe}} = 8.313/T + 1.839 \times 10^{-3} \quad (r=-0.88), \quad (38)$$

1400°C 时, 由式(32)计算出 Mn-C 系 C 溶解度为 0.2716, 此值对 0.275^[4] 的相对误差为 -1.24%。由 Mn-C 系的 X_C^0 和式(33)得到:

$$\Delta\bar{G}_{\text{Mn,C}}^0 = 26720 - 57.45T \quad (\text{J/mol}), \quad (39)$$

该值对表 3 中列出值的最大相对误差的绝对值为 0.39%。

类似地得到 Mn-Fe-C 熔体中 C 溶解度的另一计算式为

$$X_C = 0.6321e^{-1414/T} - 0.1001X_{\text{Fe}}. \quad (40)$$

3.4 热力学性质对温度关系式的一致性检验

3.4.1 Fe 基体系热力学性质对温度关系式的一致性检验

Fe-C 系 C 饱和溶解度与温度的关系式为

$$\Delta\bar{G}_{\text{Fe,C}}^0 = 45850 - 55.84T = -2.303RT \lg a_{\text{C},\%} = -2.303RT \lg(f_{\text{C}}[\% \text{C}]). \quad (41)$$

由 $\lg f_{\text{C}} = e_C^{\text{C}}[\% \text{C}]$ 和式(41)得到:

$$\lg[\% \text{C}] + e_C^{\text{C}}[\% \text{C}] - \lg a_{\text{C},\%} = 0. \quad (42)$$

用式(41)计算出 1723 K 时的 $a_{\text{C},\%}$, 用式(24)计算出 1723 K 时的 e_C^{C} , 代入式(42)得到:

$$\lg[\% \text{C}] + 0.1632[\% \text{C}] - 1.527 = 0. \quad (43)$$

由式(43)得 1723 K 时 Fe-C 系 C 的溶解度为 5.047%, 对用式(21)计算值的相对误差为 -2.32%。

3.4.2 Mn 基体系热力学性质对温度关系式的一致性检验

类似于 Fe 基体系的检验, 得到计算 1698 K 时 Mn-C 系 C 的溶解度方程式为

$$\lg[\% \text{C}] + 0.1801[\% \text{C}] - 2.1791 = 0. \quad (44)$$

解式(44)得到 C 溶解度为 7.303%, 此值对由式(32)计算值的相对误差为 -4.55%。

4 结 论

(1) Mn-Fe-C 熔体从纯 Mn 到纯 Fe 浓度范围, C 溶解度计算式为 $X_C = 1.123e^{-2955/T} + 0.1112X_{Mn}$ 或 $X_C = 0.6321e^{-1414/T} - 0.1001X_{Fe}$.

(2) Fe-C 系和 Fe-Mn-C 系热力学性质与温度($1350^{\circ}\text{C} \leq T \leq 1450^{\circ}\text{C}$)的关系式有：
 $\ln\gamma_C^0 = 5515/T - 3.498$, $\varepsilon_C^0 = 5796/T + 6.290$, $e_C^0 = 157.6/T + 7.172 \times 10^{-2}$, $\lg X_{Fe,C}^b = -1283/T + 5.043 \times 10^{-2}$, $\Delta\bar{G}_{Fe,C}^0 = 45850 - 55.847$, $\alpha_C^0 = -1447/T + 0.2813$, $\varepsilon_C^{Mn} = -2301/T - 0.2930$ 和 $e_C^{Mn} = -7.779/T - 1.848 \times 10^{-3}$.

(3) Mn-C 系和 Mn-Fe-C 系热力学性质与温度($1350^{\circ}\text{C} \leq T \leq 1450^{\circ}\text{C}$)的关系式有：
 $\ln\gamma_C^0 = 3214/T - 3.791$, $\varepsilon_C^0 = 9883/T + 5.777$, $e_C^0 = 221.8/T + 4.939 \times 10^{-2}$, $\lg X_{Mn,C}^b = -613.8/T - 0.1992$, $\Delta\bar{G}_{Mn,C}^0 = 26720 - 57.45T$, $\alpha_C^0 = 582.5/T + 2.037 \times 10^{-2}$, $\varepsilon_C^{Fe} = 1776/T + 0.4760$ 和 $e_C^{Fe} = 8.313/T + 1.839 \times 10^{-3}$.

符号表：

a	二元系中 C 的溶解度 (摩尔分数)	R	气体常数 [J/(mol·K)]
$ac, \%$	C 的活度, 1%(ω)浓度溶液标准态	T	热力学温度 (K)
b	三元体系中 j 组元对 C 溶解度的影响率	X_i	i 组元的摩尔浓度
e_i^j	j 组元对 i 组元的等浓度活度相互作用系数	$X_{j,C}^{b,exp}$	文献的 j -C 二元系中 C 的溶解度 (摩尔分数)
f_i	i 组元的活度系数, 1%(ω)浓度溶液标准态	γ_i^0	i 组元活度系数, 纯 i 组元标准态
$\Delta\bar{G}_{j,C}^0$	j -C 二元系中 C 的标准溶解 Gibbs 自由能 (J/mol)	γ_i^0	二元系溶质 i 浓度无限稀时 i 的活度系数, 纯 i 组元标准态
[% i]	i 组元的浓度(%, ω)	ε_i^j	j 对 i 的等浓度活度相互作用系数 (摩尔分数为基础)
M_1	溶剂的摩尔质量 (kg/mol)	α_i^j	j 对 i 的等活度活度相互作用系数 (摩尔分数为基础)
M_j	j 组元的摩尔质量 (kg/mol)		

参考文献：

- [1] 真屋敬一, 松尾亨. Dephosphorization of High Molten Iron Treated with BaO-BaCl₂-MnO Flux and Oxidation by MnO₂ [J]. 铁与钢, 1996, 82: 123-128.
- [2] 藤田正村, 片山裕之, 山本明, 等. Dephosphorization of Fe-Mn-C Alloy with BaCO₃ [J]. 铁与钢, 1988, 74: 816-822.
- [3] 相天英二, 闵东骏, 佐野信雄. Phosphorus Distribution between Mn-Si Melts and CaO-SiO₂-MnO-CaF₂ Slags [J]. 铁与钢, 1988, 74: 1931-1938.
- [4] 倪瑞明, 马中庭, 魏寿昆. Mn-Fe-C, Mn-Si-C 体系热力学性质研究 [J]. 钢铁研究学报, 1990, 2(4): 17-22.
- [5] 郭上型, 董元篪. Fe-Mn-C-P 系高锰熔体的热力学研究 [J]. 金属学报, 1995, 31(6): B241-246.
- [6] 陈二保, 董元篪, 郭上型. Mn-Fe 合金熔体热力学性质研究 [J]. 金属学报, 1997, 33(8): 831-837.
- [7] 黄希祐. 钢铁冶金原理, 修订版 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1990. 37, 183.
- [8] 魏寿昆. 冶金过程热力学 [M]. 上海: 科学技术出版社, 1980. 388.
- [9] 陈家祥. 炼钢常用图表数据手册 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1984. 519.
- [10] 陈二保, 董元篪. Fe-j-C 系热力学性质的研究 [J]. 华东冶金学院学报, 1998, 15(3): 227-231.
- [11] Turkdogan E T, Leake L E. Thermodynamics of Carbon Dissolved in Iron Alloy [J]. J. Iron Steel Inst., 1995, 179: 39-45.
- [12] 梁连科, 车荫昌, 杨怀, 等. 冶金热力学及动力学 [M]. 沈阳: 东北工学院出版社, 1990. 317.

Activity Interaction Coefficients in Mn-Fe-C Melts

CHEN Er-bao, DONG Yuan-chi, GUO Shang-xing

(School of Metallurgy & Materials, Anhui University of Technology, Maanshan, Anhui 243002, China)

Abstract: The solubility of carbon in Mn-Fe-C melts was measured experimentally at different temperatures to obtain the activity interaction coefficients in Mn-Fe-C melts. A new method is used to treat experimental results. By thermodynamical derivation and calculation, some important relations between thermodynamical properties in Mn-Fe-C melts and temperature were obtained.

Key words: Mn-Fe-C melt; activity interaction coefficient; thermodynamical properties; linear regression; temperature