

Evolución de Gases de Origen Volcánico en Atmósferas de Exoplanetas Rocosos

Andrés Felipe Ortiz Ferreira

Trabajo de Grado para Optar al Título de Geólogo

Director

Pablo Andrés Cuartas Restrepo

Doctor en Física

Universidad de Antioquia

Co-Directora

Dayana Andrea Schonwalder Angel

Doctora en Geología

Universidad Industrial de Santander

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Geología

Bucaramanga

2026

*A todas aquellas personas que han crecido en barrio popular,
y siempre han soñado con un mejor futuro.*

Agradecimientos

Gracias Pablo y Dayana por la paciencia y confianza que tuvieron siendo mis directores. Les agradezco por haber confiado en mí antes de que el proyecto tuviera objetivos claros. Decidieron creer en una idea que se fue consolidando en el camino y depositar su confianza en un entusiasta de las ciencias planetarias, que aunque tenía claro lo que quería hacer, no sabía cómo hacerlo. Gracias por esperarme durante los largos meses en los que no pude avanzar en este trabajo, y por darme palabras de aliento para seguir adelante.

Gran parte de estos resultados se obtuvieron durante la pasantía de investigación que realicé en la Universidad Tecnológica de Chalmers. Agradezco a las personas que fueron importantes durante este proceso, especialmente a Giuseppe y Oliver por el apoyo académico, y a Darling por el apoyo emocional que me brindó con su amistad.

Al Halley, mi familia académica, que me brindaron el apoyo que necesité para poder cumplir varios sueños, como observar por primera vez a través de un telescopio o presentar proyectos en congresos. Por permitirme trabajar con diferentes auxilias cuando lo necesité. Por brindarme un espacio en la oficina donde pude escribir esta tesis. Gracias por mejorar mi formación como futuro científico a través de espacios académicos que fueron muy enriquecedores. Por las amistades que formé, las cuales superan lo académico. En especial, quiero agradecer a los de la oficina por ser compañeros que se convirtieron en amigos con los que compartí una gran parte de mi vida universitaria.

A mis Foráneos, Dilan, Gerson, Maura y Jan, gracias por demostrarme que Jaime Garzón tenía razón cuando dijo que la universidad era la etapa más bonita de la vida. Todos los *performances* que hicimos siempre los guardaré en mi memoria y los recordaré con mucho cariño.

A Steven, por las conversaciones que tuvimos, que escuché como consejos cuando lo eran, o que disfruté como simples conversaciones de la vida. Que me escuchó decir varias veces que no podía avanzar en la tesis y que me brindó palabras de apoyo para no perder la confianza.

A Dani, por hacer de los días de escritura, días más amenos con su compañía.

A los demás amigos que hice durante la universidad, con quienes compartí espacios académicos y sociales. Algunos de ellos que me ayudaron cuando no tenía para pagar arriendos, que me brindaron un apoyo cuando no tenía dinero para ir a salidas de campo o para comprar comida. Siempre estaré agradecido con ustedes, aunque en algunos casos ya no tengamos contacto. La memoria no olvida y las palabras de agradecimiento no bastan.

A los compañeros que conocí en asambleas o espacios de lucha, mucha gratitud a la experiencia política que me brindaron. La libertad de pensamiento político es algo que siempre anhele, y pude encontrar en la universidad pública. Las figuras que me inspiraron en la vida siempre han sido personas que lucharon y murieron por causas que yo considero justas, como Carlos Pizarro, Camilo Torres o Jaime Garzón. Personas que formaron mi pensamiento político y social. Me enseñaron que las ideas no terminan con la muerte, reviven, y se siembran en el pensamiento de las siguientes generaciones.

A la UIS, por ser ese espacio de crecimiento intelectual que siempre soñé. Por permitirme ser un estudiante de universidad pública y brindarme las ayudas necesarias para poder culminar mi pregrado.

A comedores, por darme alimentación tantos semestres. Quienes me conocen saben cuánto amo y defiendo este servicio. Gracias a Don Jaime, por salvarme más de una vez con el pago de las comidas.

Al Profe Oscar, gracias por apasionarme por la ciencia y por convertirse en una figura a seguir.

A mi papá, por ser la única persona que siguió confiando en mí cuando nadie más lo hizo y por enseñarme que un lápiz pesa menos que una pala. A mi mamá, por sacrificar tanto de su vida por mí. A ambos, espero alguna vez retribuirles.

A mi familia materna y paterna, por el apoyo que cada uno me brindó durante diferentes etapas de mi pregrado.

A mis dos mejores amigos del colegio, Heber y Dani, gracias por querer compartir conversaciones, salidas a comer, y cumpleaños conmigo, cada vez que regresaba a Cúcuta. Gracias por hacer de las vacaciones días más bonitos.

A mi hogar, por permitirme nacer, crecer, y formarme como persona. Durante estos años de pregrado cambié de ciudad, pero jamás me olvidé de mi Cúcuta, y menos de mi barrio. Todas las veces que me fui, conté los días que faltaban para regresar. Siempre anhelando regresar con un mejor presente, aunque muchas veces no fue así. En muchos de esos momentos me replanteaba el propósito de lo que hago.

Tendré en mi memoria a los que alguna vez fueron amigos pero ya no están presentes porque emigraron a otras tierras, están cumpliendo condenas o han muerto. Varios de ustedes me decían que no estuviera en la calle, que me iba mejor en el colegio que peleando, que mi camino era ese, el estudio. Me hubiese gustado verlos a ustedes también estudiando. Estoy seguro que varios de ustedes hubiesen escrito una mejor tesis que la mía.

Donde crecimos no es común hablar de ciencia. La falta de oportunidades y la desigualdad social se encargan de que los pensamientos de un niño lleguen a muchos lados, menos

a la ciencia. En mi caso personal, tuve suerte en muchas ocasiones en la vida, que me permitieron seguir este camino. Pero quiero que las siguientes generaciones no dependan de la suerte, que tengan las oportunidades de educación que la mayoría de mi generación no tuvo. Quiero hacer del presente un mejor futuro para las siguientes generaciones de mi barrio.

Ningún logro personal será más importante que ayudar a mi barrio. Por ese motivo durante todo mi pregrado, siempre tuve en mi mente el pensamiento de cómo llevar la ciencia a mi barrio, porque pienso que es deber de los que hemos salido buscando el conocimiento, traerlo de vuelta, para que las siguientes generaciones tengan un futuro con más oportunidades. Aún estoy lejos de lograrlo, pero esta tesis va dedicada a la memoria de muchos sueños que se quedaron en las calles de mi barrio.

La ciencia puede transformar la sociedad. Lo ha hecho durante toda nuestra historia como humanidad. El deber de los científicos que crecimos en barrios populares, veredas o pueblos, es llevar la ciencia hacia nuestras comunidades. Porque es fácil hablar de ciencia dentro de una universidad, dentro de los muros universitarios las personas tienen acceso a ese conocimiento sin necesidad de alzar la voz. Lo difícil es llevar la ciencia a sitios donde las personas no la conocen y hacer que se escuche. Ese debe ser nuestro propósito como científicos, luchar por la democratización del conocimiento, porque la ciencia que no tiene un impacto social, es una ciencia burguesa.

A las personas que creen que podré lograr un cambio en mi barrio con la ciencia, gracias por darme la confianza necesaria para seguir creyendo incluso en días que ni siquiera yo creo en mí.

Finalmente, aunque soy consciente que son palabras al aire, porque son palabras escritas para una persona que no me leerá, quiero agradecer a Canserbero, por ser la primera persona en permitirme soñar con que un niño de barrio puede convertirse en científico. Estoy seguro que mi mayor orgullo en el futuro será decir que fui el primer científico de mi barrio, pero mi mayor sueño es ayudar a que más niños de mi barrio sueñen con convertirse en científicos.

Tabla de Contenido

| | |
|--|-----------|
| Introducción | 13 |
| 1. Marco teórico | 14 |
| 1.1. Vulcanismo y efectos atmosféricos en la Tierra | 14 |
| 1.1.1. Tectónica de placas y generación de magma | 14 |
| 1.1.2. Tipos de erupciones volcánicas | 15 |
| 1.1.3. Erupciones históricas | 16 |
| 1.1.4. Efectos atmosféricos | 17 |
| 1.2. Vulcanismo en el Sistema Solar | 17 |
| 1.2.1. La Luna | 18 |
| 1.2.2. Mercurio | 18 |
| 1.2.3. Venus | 18 |
| 1.2.4. Marte | 19 |
| 1.2.5. Io | 19 |
| 1.2.6. Criovulcanismo | 19 |
| 1.3. Exoplanetas rocosos | 20 |
| 1.3.1. Atmosferas de exoplanetas rocosos | 20 |
| 1.3.2. Tipos de atmosferas en exoplanetas | 21 |
| 1.4. Fugacidad de oxígeno (f_{O_2}) | 23 |
| 1.5. Métodos de observación de atmosferas en exoplanetas rocosos | 24 |
| 1.6. Observación de atmosferas planetarias | 25 |
| 1.6.1. Telescopio Espacial James Webb (JWST) | 25 |
| 2. Planteamiento del problema | 26 |
| 3. Objetivos | 27 |
| 3.1. Objetivo general | 27 |
| 3.2. Objetivos específicos | 27 |
| 4. Metodología | 27 |
| 4.1. Introducción a EVolve | 28 |
| 4.2. Pasos generales de configuración de EVolve | 28 |
| 4.3. Exploración del espacio de parámetros | 30 |
| 4.4. Estudiando los tipos atmosféricos que existen | 30 |
| 4.5. Comparación con 10 masas terrestres | 30 |
| 4.6. Evaluación de la observabilidad | 31 |
| 5. Resultados | 32 |

| | |
|---|-----------|
| 5.1. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar | 32 |
| 5.2. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H ₂ O/CO ₂ igual a 1 en el manto | 35 |
| 5.3. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H ₂ O/CO ₂ igual a 0.5 en el manto | 36 |
| 5.4. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H ₂ O/CO ₂ igual a 2 en el manto | 39 |
| 5.5. Evolución atmosférica final | 41 |
| 5.5.1. Composición doble | 41 |
| 5.6. Material fundido en función de la masa planetaria | 42 |
| 5.6.1. Derivación del escalamiento del flujo de calor y su relación con el <i>melt flux</i> | 43 |
| 5.6.2. Cálculo del <i>melt flux</i> para diferentes valores de masa planetaria | 45 |
| 5.7. Atmósferas para planetas con mayor masa | 48 |
| 5.8. Comparación de la composición química atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres | 51 |
| 5.9. Comparación final de todas las simulaciones | 54 |
| 5.10. Detectabilidad de gases volcánicos con JWST | 56 |
| 5.10.1. Ventanas espectrales y configuraciones instrumentales óptimas | 56 |
| 5.10.2. Caso de estudio: atmósfera con alto estado redox mantélico | 58 |
| 5.10.3. Estimación de señales de transmisión | 58 |
| 5.10.4. Análisis cuantitativo de detectabilidad: SO ₂ y CO ₂ | 59 |
| 5.10.5. Dependencia de la detectabilidad con el estado redox mantélico | 60 |
| 5.10.6. Análisis de detectabilidad y conexión con simulaciones | 61 |
| 6. Discusión | 62 |
| 6.1. EVolve como herramienta integradora de procesos planetarios | 62 |
| 6.2. El estado redox del manto como organizador composicional | 63 |
| 6.3. Efecto de la masa planetaria sobre la desgasificación y composición atmosférica | 65 |
| 6.4. Conservación elemental y equilibrio químico: implicaciones para la interpretación observacional | 67 |
| 6.5. Detectabilidad de firmas volcánicas con JWST: oportunidades y limitaciones | 69 |
| 6.6. Comparación con estudios previos y contexto en la literatura | 70 |
| 6.7. Implicaciones para la interpretación de futuras observaciones | 72 |
| 6.8. Contexto en el Sistema Solar: Venus, Tierra y Marte | 73 |
| 6.9. Limitaciones y recomendaciones | 74 |
| 6.10. Síntesis de la discusión | 76 |
| 7. Conclusiones | 81 |
| Referencias Bibliográficas | 84 |

Lista de Figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1.1. Clasificación atmosférica en el espacio elemental H-C-O. | 22 |
| Figura 5.1. Evolución atmosférica a 600 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar. | 33 |
| Figura 5.2. Evolución atmosférica a 800 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar. | 34 |
| Figura 5.3. Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar. | 35 |
| Figura 5.4. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar. | 35 |
| Figura 5.5. Evolución atmosférica a 600 K, para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 36 |
| Figura 5.6. Evolución atmosférica a 800 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 37 |
| Figura 5.7. Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 37 |
| Figura 5.8. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 38 |
| Figura 5.9. Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto. | 38 |
| Figura 5.10. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto. | 39 |
| Figura 5.11. Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto. | 40 |
| Figura 5.12. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto. | 40 |
| Figura 5.13. Evolución final de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y distintas relaciones H_2O/CO_2 en el manto. | 41 |
| Figura 5.14. Evolución final de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y el doble de las relaciones H_2O/CO_2 en el manto. | 42 |
| Figura 5.15. Cantidad de material fundido en función de la masa planetaria. | 47 |
| Figura 5.16. Cambio composicional según la masa terrestre (las moléculas que no se observan están con valores muy cercanos a cero). | 47 |
| Figura 5.17. Cambio de la altura atmosférica según la masa terrestre | 48 |
| Figura 5.18. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y composición mantélica estándar. | 49 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.19. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 50 |
| Figura 5.20. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto. | 50 |
| Figura 5.21. Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto. | 51 |
| Figura 5.22. Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres y composición mantélica estándar. | 52 |
| Figura 5.23. Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto. | 53 |
| Figura 5.24. Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto. | 54 |
| Figura 5.25. Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto. | 55 |
| Figura 5.26. Gráfica final de la evolución y clasificación atmosférica de todas las simulaciones. | 55 |

Lista de Tablas

| | |
|--|----|
| <i>Tabla 1.1. Clasificación de eventos volcánicos según el VEI. Modificado de Miller and Wark (2008).</i> | 15 |
| <i>Tabla 5.1. Composición de volátiles en el manto adoptada como condición inicial para cada evolución numérica.</i> | 33 |
| <i>Tabla 5.2. Composición del manto para cada evolución con abundancias de volátiles duplicadas respecto al caso estándar.</i> | 42 |
| <i>Tabla 5.3. Escalamiento del radio y melt flux con la masa planetaria</i> | 46 |
| <i>Tabla 5.4. Ventanas espectrales de gases volcánicos y configuraciones instrumentales óptimas del JWST. Selección basada en intensidad de bandas, superposición espectral mínima y validación observacional (Greene et al., 2016; Batalha et al., 2017; Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023a).</i> | 57 |
| <i>Tabla 5.5. Detectabilidad estimada de gases volcánicos con JWST para atmósfera secundaria con $\Delta IW = +6$ alrededor de estrella tipo TRAPPIST-1.</i> | 61 |

Resumen

Título: Evolución de gases de origen volcánico en atmósferas de exoplanetas rocosos *

Autor: Andrés Felipe Ortiz Ferreira **

Palabras Clave: Exoplanetas rocosos, atmósferas planetarias, gases volcánicos, Telescopio Espacial James Webb (JWST).

Descripción: En este trabajo se analiza la evolución de gases de origen volcánico en atmósferas secundarias de exoplanetas rocosos mediante simulaciones numéricas. Se utiliza el código EVolve para explorar el efecto de la fugacidad de oxígeno (ΔIW) y de la masa planetaria sobre la composición atmosférica resultante, considerando especies como SO_2 , CO_2 y H_2O , entre otras. La metodología asume desgasificación controlada por la solubilidad en el manto y química de equilibrio en la atmósfera. Los resultados identifican un umbral redox crítico ($\Delta IW \approx +3$) que separa atmósferas tipo C (dominadas por H_2O , CO_2 , CH_4) de atmósferas tipo B (dominadas por O_2) bajo condiciones estrictamente geológicas. Los planetas de $10 M_{\oplus}$ exhiben menor abundancia atmosférica de especies sulfuradas que planetas de masa terrestre a pesar de generar ~ 5 veces más material fundido, revelando una anticorrelación entre masa planetaria y eficiencia de desgasificación. El análisis de detectabilidad con el Telescopio Espacial James Webb demuestra que SO_2 y CO_2 son accesibles en 2–3 tránsitos para sistemas análogos a TRAPPIST-1 bajo condiciones oxidantes, habilitando la caracterización indirecta del estado redox mantélico mediante espectroscopía atmosférica. Este trabajo establece un marco predictivo que vincula observaciones atmosféricas con procesos en el interior planetario y proporciona criterios cuantitativos para distinguir firmas volcánicas de señales potencialmente biogénicas en exoplanetas rocosos.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Geología, Pablo Andrés Cuartas Restrepo (Director), Dayana Andrea Schonwalder Angel (Codirectora).

Abstract

Title: Evolution of volcanic-origin gases in the atmospheres of rocky exoplanets *

Author: Andrés Felipe Ortiz Ferreira **

Keywords: Rocky exoplanets, planetary atmospheres, volcanic gases, James Webb Space Telescope (JWST).

Description: In this work, we analyze the evolution of volcanic-origin gases in secondary atmospheres of rocky exoplanets through numerical simulations. The E_Volve code is used to explore the effect of oxygen fugacity (ΔIW) and planetary mass on the resulting atmospheric composition, considering species such as SO_2 , CO_2 , and H_2O , among others. The methodology assumes degassing controlled by mantle solubility and chemical equilibrium in the atmosphere. The results identify a critical redox threshold ($\Delta IW \approx +3$) that separates type C atmospheres (dominated by H_2O , CO_2 , CH_4) from type B atmospheres (dominated by O_2) under strictly geological conditions. Planets of $10 M_{\oplus}$ exhibit lower atmospheric abundances of sulfur species than Earth-mass planets despite generating ~ 5 times more melt, revealing an anticorrelation between planetary mass and degassing efficiency. Detectability analysis with the James Webb Space Telescope demonstrates that SO_2 and CO_2 are accessible in 2–3 transits for systems analogous to TRAPPIST-1 under oxidizing conditions, enabling indirect characterization of the mantle redox state through atmospheric spectroscopy. This work establishes a predictive framework linking atmospheric observations with interior planetary processes and provides quantitative criteria to distinguish volcanic signatures from potentially biogenic signals in rocky exoplanets.

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Geología, Pablo Andrés Cuartas Restrepo (Director), Dayana Andrea Schonwalder Angel (Codirectora).

Introducción

La detección y caracterización de exoplanetas rocosos ha avanzado significativamente en las últimas décadas gracias a misiones espaciales y avances en la tecnología de telescopios (Madhusudhan, 2019). Estos exoplanetas, también conocidos como planetas terrestres, son de particular interés debido a su potencial para albergar condiciones favorables para la vida tal como la conocemos (Seager and Lissauer, 2010). Un aspecto crucial para comprender la habitabilidad de estos planetas es el estudio de sus atmósferas y la posible actividad volcánica, la cual puede influir de manera significativa en su evolución atmosférica y climática (Wordsworth and Kreidberg, 2022).

El vulcanismo es un proceso geológico fundamental que no solo da forma a la superficie de los planetas, sino que también afecta significativamente la composición de sus atmósferas (Sigurdsson et al., 2015). En la Tierra, las erupciones volcánicas emiten una variedad de gases y partículas, como dióxido de carbono (CO_2), dióxido de azufre (SO_2) y vapor de agua (H_2O), que pueden modificar el clima y la composición atmosférica (Cole-Dai, 2010). Este fenómeno no es exclusivo de nuestro planeta; se ha observado actividad volcánica en otros cuerpos del Sistema Solar, como Io, Venus y Marte, así como en lunas heladas donde ocurre criovulcanismo (de Pater et al., 2021; Xiao et al., 2023). Las erupciones volcánicas han tenido efectos profundos en el clima y la habitabilidad de la Tierra, lo que sugiere que procesos análogos podrían estar ocurriendo en exoplanetas rocosos, afectando de manera similar sus atmósferas y potencial habitabilidad (Kaltenegger et al., 2010). El análisis de la evolución de estos gases no solo proporciona información sobre la actividad volcánica actual, sino que también ofrece indicios sobre la tectónica y la evolución geológica de los exoplanetas (Ostberg et al., 2023).

El estado redox del manto, expresado como fugacidad de oxígeno f_{O_2} y referenciado en la escala ΔIW , controla la especiación de C, O, H y S. En ambientes más oxidantes (mayor ΔIW) se favorecen, en términos generales, CO_2 frente a CO o CH_4 , y SO_2 frente a H_2S ; condiciones más reductoras invierten estos equilibrios (Wordsworth and Kreidberg, 2022). En consecuencia, f_{O_2} constituye un parámetro de primer orden que organiza los regímenes composicionales y sus trayectorias evolutivas. Los parámetros físicos del planeta condicionan la evolución composicional. En particular, la masa planetaria condiciona la solubilidad de los volátiles, la eficiencia de la desgasificación y los procesos de pérdida atmosférica, incidiendo tanto en la tasa como en la trayectoria de dicha evolución.

La evolución de atmósferas secundarias generadas por desgasificación en exoplanetas rocosos se plantea como un problema controlado por el estado redox del manto (ΔIW) y la masa planetaria (M_p). Se asume una fuente de volátiles determinada por la solubilidad en el manto y una atmósfera descrita por química de equilibrio; en este marco, ΔIW define umbrales composicionales y M_p modula su posición al influir en la liberación y la retención de volátiles. La exploración sistemática del espacio ($\Delta IW, M_p$) permite establecer criterios de clasificación reproducibles basados en las mezclas dominantes de especies (SO_2, CO_2, H_2O) y evaluar la capacidad del JWST para detectar estas moléculas.

1. Marco teórico

1.1. Vulcanismo y efectos atmosféricos en la Tierra

1.1.1. *Tectónica de placas y generación de magma*

La dinámica tectónica determina la distribución, comportamiento y composición química de los volcanes en la Tierra (Acocella, 2021). Las erupciones volcánicas pueden impulsar gases y partículas a la atmósfera, siendo las erupciones explosivas, que son comunes en zonas de subducción, más propensas a emitir grandes cantidades, llegando a superar los 1000 km^3 de volumen eyectado (Cole-Dai, 2010). Sin embargo, también hay erupciones efusivas que liberan significativos volúmenes de gases (Thordarson and Larsen, 2007). No todas las erupciones explosivas ocurren en zonas de subducción; por ejemplo, volcanes en puntos calientes como Hawái a veces experimentan erupciones explosivas (Cashman and Sparks, 2013). La influencia de estas erupciones en el clima terrestre depende de la magnitud de la erupción y de los niveles de la atmósfera que alcancen, lo cual puede resultar en efectos significativos y prolongados (Siebert et al., 2015).

La formación de magma se produce principalmente por la descompresión de material del manto terrestre y la reducción de su punto de fusión, un proceso ligado a la tectónica de placas (Sigurdsson et al., 2015). La composición de los magmas, incluyendo su contenido de gas y viscosidad, varía ampliamente. En las zonas de corteza continental, los magmas suelen tener composiciones que oscilan entre andesitas y riolitas (SiO_2 55-70 wt. %), lo que los hace más viscosos en comparación con los magmas más máficos de zonas de rift o puntos calientes (SiO_2 aproximadamente 45 wt. %) (Siebert et al., 2015). El tipo de erupción está determinado por la liberación de gases disueltos durante el ascenso del magma y la disminución de presión; las liberaciones graduales tienden a resultar en

erupciones efusivas (Thordarson and Larsen, 2007). Por otro lado, los magmas viscosos tienen una mayor capacidad para atrapar gases, aumentando así la presión interna, lo que eventualmente provoca erupciones explosivas que fragmentan el magma en tefra volcánica (Swingedouw et al., 2017).

1.1.2. Tipos de erupciones volcánicas

El índice de explosividad volcánica (VEI, por sus siglas en inglés) es una escala logarítmica que cuantifica la magnitud de las erupciones volcánicas en términos de volumen de material expulsado, altura de la columna eruptiva y duración de la erupción (Newhall and Self, 1982). Clasifica los eventos volcánicos desde 0 para erupciones no explosivas hasta 8 para las erupciones más grandes registradas (Tabla 1.1). La escala logarítmica establece que cada incremento en el VEI corresponde a una erupción aproximadamente diez veces más potente que la del nivel anterior (Siebert et al., 2015). Por ejemplo, una erupción con un VEI de 4 es diez veces más explosiva que una con un VEI de 3 (Swingedouw et al., 2017).

Tabla 1.1

Clasificación de eventos volcánicos según el VEI. Modificado de Miller and Wark (2008).

| VEI | Altura de la pluma (Km) | Volumen eyectado (Km ³) | Frecuencia en la Tierra | Ejemplo |
|-----|-------------------------|-------------------------------------|-------------------------|------------------------------------|
| 0 | <0.1 | $\geq 10^{-6}$ | diariamente | Kilauea, Hawai'i |
| 1 | 0.1-1 | $\geq 10^{-5}$ | diariamente | Stromboli, Italy |
| 2 | 1-5 | $\geq 10^{-3}$ | semanalmente | Galeras, Colombia, 1993 |
| 3 | 3-15 | $\geq 10^{-2}$ | anualmente | Nevado del Ruiz, Colombia, 1985 |
| 4 | 10-25 | $\geq 10^{-1}$ | ~ 10 años | Soufrière Hills, West Indies, 1995 |
| 5 | >25 | ≥ 1 | ~ 50 años | Mount St. Helens, USA, 1980 |
| 6 | >25 | ≥ 10 | ~ 100 años | Pinatubo, Philippines, 1991 |
| 7 | >25 | ≥ 100 | ~ 1000 años | Tambora, Indonesia, 1815 |
| 8 | >25 | ≥ 1000 | > 10,000 años | Toba, hace 74 000 años |

Nota. Clasificación del *Volcanic Explosivity Index* (VEI) según altura de la pluma, volumen eyectado, frecuencia estimada en la Tierra y un ejemplo representativo. Modificado de Miller and Wark (2008).

Las erupciones con un VEI de 0 son no explosivas, con menos de 0.0001 km³ de material y columnas menores a 100 metros. Las de VEI 1 son levemente explosivas, con 0.0001-0.001 km³ de material y columnas de hasta 1000 metros (Newhall and Self, 1982).

Las erupciones con VEI 2 son moderadamente explosivas, expulsando 0.001-0.01 km³ de material y columnas de 1-5 km. Las erupciones con VEI 3 expulsan 0.01-0.1 km³ de material y columnas de hasta 15 km (Miller and Wark, 2008; Sigurdsson et al., 2015). El VEI 4 se asigna a erupciones con 0.1-1 km³ de material expulsado y columnas de 10-25 km. Las erupciones con VEI 5 expulsan de 1 a 10 km³ de material y columnas de más de 25 km. Las erupciones con VEI 6 liberan de 10 a 100 km³ de material y columnas superiores a 30 km (Newhall and Self, 1982; Sigurdsson et al., 2015). Las de VEI 7 expulsan de 100 a 1000 km³ de material y columnas de más de 40 km. Finalmente, el VEI 8 es para las erupciones más grandes registradas, con más de 1000 km³ de material y columnas superiores a 50 km (Miller and Wark, 2008; Michalski and Bleacher, 2013).

1.1.3. Erupciones históricas

Las erupciones de los volcanes Santa Helena, Pinatubo, Tambora y Toba destacan por su magnitud y el impacto significativo que tuvieron en la atmósfera terrestre (Cole-Dai, 2010). Estas erupciones, con un Índice de Explosividad Volcánica (VEI) de 5 para Santa Helena, 6 para Pinatubo, 7 para Tambora y 8 para Toba, se caracterizaron por la enorme cantidad de material que inyectaron en la estratosfera (Miller and Wark, 2008). Este material, compuesto principalmente por ceniza volcánica y gases como el dióxido de azufre (SO₂), provocó efectos duraderos en el clima global, por lo que estas erupciones se consideran algunas de las más importantes de la historia (Cole-Dai, 2010).

El monte Santa Helena, en Estados Unidos, tuvo una erupción en 1980 (Cashman and Sparks, 2013). Duró varios minutos la explosión principal, produjo una columna de ceniza de 19 km de altura, liberó alrededor de 0.5 megatoneladas de dióxido de azufre (SO₂) y expulsó aproximadamente 1 km³ de tefra (Brand et al., 2023).

El monte Pinatubo, en Filipinas, tuvo una erupción en 1991 (Cashman and Sparks, 2013). Duró varios días y generó una columna de ceniza que superó los 30 km de altura (Cole-Dai, 2010). La erupción liberó una gran cantidad de ceniza volcánica y 20 megatoneladas de dióxido de azufre (SO₂), expulsando aproximadamente 10 km³ de tefra (Casadevall et al., 1996).

El volcán Tambora, ubicado en Indonesia, entró en erupción en 1815 (Cashman and Sparks, 2013). Duró varias semanas y produjo columnas de ceniza que alcanzaron hasta 43 km de altura. La mayor parte del material expulsado fue en forma de flujos piroclásticos y ceniza, con aproximadamente 140 gigatoneladas de magma expulsado, equivalente a 50 km³ de roca densa (Oppenheimer, 2003). Liberó alrededor de 60 megatoneladas de dióxido de azufre (SO₂), lo que causó significativas perturbaciones climáticas globales (Cole-Dai, 2010).

El volcán Toba, ubicado en Indonesia, experimentó una de las erupciones más

grandes registradas en la historia geológica (Cashman and Sparks, 2013). Aunque se desconoce la duración exacta, se estima que las columnas de ceniza alcanzaron entre 30 y 50 km de altura (Miller and Wark, 2008). La erupción de Toba expulsó aproximadamente 2800 km³ de material volcánico, mayormente ceniza y pumita, y liberó alrededor de 6 gigatoneladas de dióxido de azufre (SO₂), contribuyendo a un enfriamiento climático global significativo y prolongado (Ge and Gao, 2020).

1.1.4. Efectos atmosféricos

Las erupciones volcánicas de gran magnitud inyectan gases ricos en azufre en la estratosfera, los cuales se transforman en aerosoles de sulfato con un tiempo de residencia de aproximadamente un año (Cole-Dai, 2010). Estos aerosoles desempeñan un papel crucial en la modificación del clima terrestre al reflejar la radiación solar, lo que disminuye la cantidad de energía solar que llega a la superficie terrestre y provoca un enfriamiento global temporal que puede durar entre uno y tres años (Siebert et al., 2015).

Además del enfriamiento, los aerosoles de sulfato absorben la radiación infrarroja emitida por la Tierra, lo que conduce a un calentamiento de la estratosfera inferior (Sigurdsson et al., 2015). Este calentamiento estratosférico puede alterar la dinámica atmosférica global, afectando los patrones climáticos (Swingedouw et al., 2017). Un efecto notable es la destrucción del ozono estratosférico, ya que los aerosoles proporcionan superficies para reacciones químicas heterogéneas que descomponen el ozono (Cole-Dai, 2010).

Las erupciones volcánicas también generan impactos climáticos regionales específicos (Siebert et al., 2015). Este cambio en la dinámica atmosférica altera los patrones de circulación, resultando en inviernos más cálidos en ciertas regiones del hemisferio norte (Swingedouw et al., 2017). Además, las erupciones volcánicas pueden debilitar los monzones de verano en Asia y África, reduciendo la precipitación debido a una disminución del contraste de temperatura entre la tierra y el mar (Sigurdsson et al., 2015).

1.2. Vulcanismo en el Sistema Solar

El vulcanismo es un proceso extendido en el Sistema Solar y ofrece un marco comparativo para entender las fuentes de calor interno, la composición y la evolución litosférica de los cuerpos planetarios. A continuación, se sintetizan casos representativos.

1.2.1. *La Luna*

La Luna se formó hace ~ 4.5 Ga por el impacto de Theia (Yin et al., 2002; Barboni et al., 2017; Halliday, 2000). El vulcanismo comenzó tras la solidificación del océano de magma, hacia ~ 4.35 Ga (Terada et al., 2007), y persistió al menos hasta ~ 2.0 Ga (Che et al., 2021), con evidencias de actividad hasta ~ 1.2 Ga (Qian et al., 2023). Los productos principales son basaltos que rellenan grandes cuencas de impacto y cubren $\gtrsim 18$ % de la superficie (Whitten and Head, 2015; Xiao et al., 2023). Se documentan estilos efusivos y explosivos; estos últimos generan mantos piroclásticos y cráteres de halo oscuro, entre otras morfologías (Head and Wilson, 2017). La inmiscibilidad de líquidos silicatados pudo originar magmas enriquecidos en sílice (Xiao et al., 2023).

1.2.2. *Mercurio*

La corteza primaria, diferenciada a partir de un océano de magma, quedó ampliamente recubierta por materiales volcánicos y fue retrabajada por impactos (McCoy et al., 2018). Las rocas ígneas muestran bajos niveles de Fe y Ti, y altos niveles de Mg y S (Weider et al., 2016). La baja viscosidad favoreció llanuras de lava extensas, análogas a provincias ígneas terrestres (Stockstill-Cahill et al., 2012; Byrne et al., 2018). Destacan llanuras intercráter (tempranas y mayormente efusivas) y llanuras suaves de alta reflectancia que ocupan depresiones y cubren ~ 27 % de la superficie (Fassett et al., 2011; Whitten et al., 2014; Murchie et al., 2018; Wang et al., 2021; Xiao et al., 2023). Se han identificado >170 depósitos piroclásticos, indicativos de magmas con volátiles (Kerber et al., 2009; Thomas et al., 2015; Xiao et al., 2023). El vulcanismo efusivo cesó hacia ~ 3.5 Ga por enfriamiento interno y compresión litosférica (Xiao et al., 2023; Deng et al., 2020), mientras que la actividad explosiva pudo persistir en tiempos geológicos recientes (Thomas et al., 2014; Xiao et al., 2021).

1.2.3. *Venus*

Venus alberga volcanes de gran tamaño (p. ej., Sif y Gula), numerosos edificios intermedios y pequeños conos agrupados (Head et al., 1992; Xiao et al., 2023). Presenta rasgos singulares como *coronae* (60–2000 km) y *novae*, asociadas a deformación y ascenso térmico (Stofan et al., 1992; Xiao et al., 2023). Los flujos de lava, emitidos desde cráteres, fisuras o depresiones, pueden alcanzar cientos de kilómetros y muestran canales bien desarrollados (Gülcher et al., 2020; Xiao et al., 2023). La superficie tiene una edad global de ~ 0.3 –1 Ga y existen indicios de vulcanismo reciente o actual (anomalías térmicas, variaciones de SO_2 , meteorización rápida de olivino, evolución de *coronae*) (Smrekar et al., 2010; Filiberto et al., 2020; Bondarenko et al., 2010; Esposito,

1984; Marcq et al., 2013; Gülcher et al., 2020).

1.2.4. Marte

Unidades volcánicas cubren $\sim 22\%$ de la superficie, con extensas llanuras y numerosos edificios (Tanaka et al., 2014). Predominan volcanes en escudo (p. ej., Olympus Mons, Alba Mons) de origen efusivo; la evidencia de explosividad es más limitada (Xiao et al., 2012, 2023; Brož et al., 2021). En Tharsis abundan conos pequeños y fisuras (Bleacher et al., 2007; Brož et al., 2015). La cronología por recuento de cráteres indica una intensa actividad en el Noeico (3.8–3.5 Ga) (Werner, 2009; Robbins et al., 2011), con registros de actividad mucho más reciente (53–210 ka) a partir de datos de *InSight* (Horvath et al., 2021). Las lavas son mayoritariamente basálticas (olivino, piroxenos, plagioclasa) (Bandfield et al., 2000; Rogers and Christensen, 2007; Ody et al., 2012), y se debate la contribución relativa de los depósitos piroclásticos en el vulcanismo temprano (Michalski and Bleacher, 2013; Huang and Xiao, 2014).

1.2.5. Io

La disipación por marea mantiene una actividad extrema; el flujo de calor es ~ 30 veces el terrestre y más de la mitad se emite en puntos calientes (de Pater et al., 2021). Se han catalogado >250 centros volcánicos con amplia variabilidad eruptiva (Veeder et al., 2015). Observaciones de *Galileo* registraron fuentes de lava desde fisuras de decenas de kilómetros y columnas de hasta ~ 1 km (Keszthelyi et al., 2001; Milazzo et al., 2005; Davies, 2010). Las temperaturas de flujo activas son comparables a las de los magmas basálticos terrestres (Johnson et al., 1988; Veeder et al., 1994). La distribución espacial del calor y la recurrencia de erupciones apuntan al acoplamiento entre fuentes profundas y la litosfera (Keane et al., 2018; de Pater et al., 2021).

1.2.6. Criovulcanismo

El criovulcanismo es una actividad eruptiva en cuerpos helados donde los materiales emitidos son los volátiles líquidos o en vapor (principalmente H_2O y salmueras, con posibles aportes de NH_3 , CH_4 , N_2 y CO_2), análoga al vulcanismo silicatado, pero con “criomagma” en lugar de magma (Xiao et al., 2023; Schenk et al., 2001; Quick et al., 2017). Se ha documentado en Ceres, Europa, Ganímedes, Encélado, Titán, Miranda, Tritón y Caronte, mediante plumas, flujos, domos y superficies rejuvenecidas por depósitos criolávicos (Geissler, 2015). Ejemplos clave incluyen plumas en Tritón observadas por *Voyager 2*, chorros de agua salada en Encélado y lagos de metano en Titán; en Europa se han reportado posibles plumas de vapor de agua (Kargel, 1994; Geissler, 2015). Las

morfologías pueden asemejarse a estructuras volcánicas de silicato (calderas, domos y campos de flujo), aunque a menudo no se preservan edificios volcánicos claros (Xiao et al., 2023; Kargel, 1994). Su ocurrencia requiere (i) la generación de líquidos internos y (ii) vías de ascenso hacia la superficie (fracturas, diapiros, descompresión o desestabilización de clatratos); la presencia de sales y amoníaco reduce el punto de fusión del hielo y facilita la existencia de líquidos a bajas temperaturas (Castillo-Rogez et al., 2018). Las fuentes de calor que lo posibilitan incluyen la disipación por mareas, el decaimiento radiogénico y el calor residual (Xiao et al., 2023).

1.3. Exoplanetas rocosos

Los exoplanetas rocosos, también conocidos como planetas terrestres, son aquellos ubicados fuera de nuestro sistema solar que presentan características composicionales similares a las de la Tierra y otros planetas terrestres, como Venus, Marte y Mercurio (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Estos planetas están constituidos principalmente por roca y metal, a diferencia de los gigantes gaseosos que están compuestos mayoritariamente por hidrógeno y helio (Madhusudhan, 2019).

La estructura interna de los exoplanetas rocosos se asemeja a la de los planetas terrestres del sistema solar. Estos exoplanetas poseen un núcleo metálico, compuesto generalmente de hierro, y un manto rocoso constituido principalmente por silicatos (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Esta configuración les confiere una densidad relativamente alta en comparación con los planetas gaseosos (Charnay and Drossart, 2023).

La masa y el radio de un exoplaneta rocoso son parámetros importantes para determinar su composición (Charnay and Drossart, 2023). Por lo general, estos planetas tienen un radio de hasta aproximadamente 1.6 veces el radio de la Tierra y una masa de hasta 10 veces la masa terrestre (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Cuando estos límites son superados, es probable que los planetas posean atmósferas más espesas dominadas por hidrógeno, lo que los clasifica como sub-Neptunos o gigantes gaseosos (Madhusudhan, 2019).

1.3.1. Atmósferas de exoplanetas rocosos

Los exoplanetas rocosos pueden adquirir atmósferas a través de dos mecanismos principales: la captura de gases del disco protoplanetario y la liberación de volátiles desde su interior (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Durante su formación, estos planetas pueden capturar una atmósfera primordial compuesta predominantemente por hidrógeno

y helio, provenientes del disco protoplanetario circundante (Charnay and Drossart, 2023). No obstante, estas atmósferas primordiales tienden a perderse rápidamente debido a la intensa irradiación ultravioleta (UV) y de rayos X (XUV) de la estrella anfitriona, así como al calentamiento interno del propio planeta (Madhusudhan, 2019).

Una vez que han perdido sus atmósferas primordiales, los exoplanetas rocosos pueden desarrollar atmósferas secundarias a través de procesos como la liberación de volátiles desde el interior del planeta (desgasificación) y la acreción de cometas y asteroides ricos en volátiles (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Estas atmósferas secundarias pueden mostrar una notable diversidad composicional, influenciada por factores como la proximidad del planeta a su estrella, la actividad estelar y las interacciones geológicas internas (Madhusudhan, 2019). Por ejemplo, algunas atmósferas pueden estar dominadas por dióxido de carbono, similar a la de Venus, mientras que otras pueden tener altas concentraciones de nitrógeno y oxígeno, semejantes a las de la Tierra (Wordsworth and Kreidberg, 2022).

Las atmósferas de los exoplanetas rocosos están ligadas a sus interiores planetarios (Charnay and Drossart, 2023). Los procesos de desgasificación, mediante los cuales se liberan gases desde el interior del planeta, pueden enriquecer la atmósfera con volátiles como el dióxido de carbono y el vapor de agua (Madhusudhan, 2019). Además, la interacción con la superficie del planeta, incluyendo la formación de océanos y la actividad volcánica, puede alterar significativamente la composición atmosférica a lo largo del tiempo (Kaltenegger et al., 2010; Wordsworth and Kreidberg, 2022; Ostberg et al., 2023).

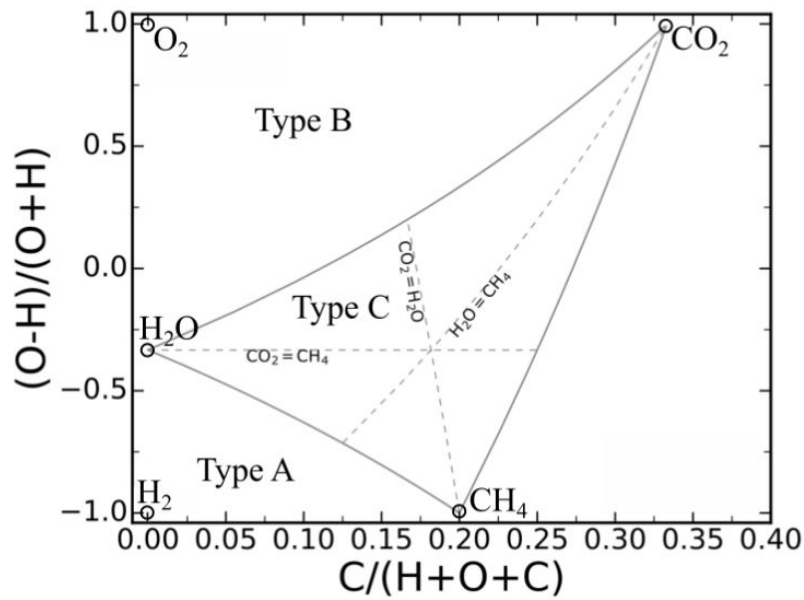
1.3.2. Tipos de atmósferas en exoplanetas

En la literatura existen varios esquemas de clasificación de atmósferas de exoplanetas; en este trabajo se adopta la clasificación de (Woitke et al., 2021). En esta propuesta, las atmósferas de tipo A son reductoras (altas abundancias de H_2 y bajas de CO_2); las de tipo B son oxidantes (altas abundancias de O_2 , con la atmósfera terrestre actual como referencia); y las de tipo C agrupan mezclas en las que H_2O , CO_2 , CH_4 y N_2 son componentes principales sin un oxidante o reductor claramente dominante.

El diagrama triangular H–C–O se construye a partir de las abundancias atómicas totales H , C y O . Las fronteras entre dominios provienen de balances estequiométricos que indican la presencia o ausencia de especies mayoritarias:

Figura 1.1.

Clasificación atmosférica en el espacio elemental H-C-O.



Nota. Clasificación atmosférica en el espacio elemental H-C-O. Las curvas descritas en las relaciones (1.1), (1.2) y (1.3) separan dominios donde ciertas especies mayoritarias no pueden coexistir bajo el esquema estequiométrico simplificado de Woitke et al. (2021).

$$O_2 \text{ presente; } CH_4 \text{ ausente: } O \geq 2C + \frac{1}{2}H, \quad (1.1)$$

$$H_2 \text{ presente; } CO_2 \text{ ausente: } H \geq 2O + 4C, \quad (1.2)$$

$$H_2O \text{ ausente: } C \geq \frac{1}{4}H + \frac{1}{2}O. \quad (1.3)$$

Las curvas de igual abundancia (por ejemplo, $p_{CO_2} = p_{CH_4}$) no se deducen del balance elemental, sino de condiciones de equilibrio químico que dependen de la temperatura y de la presión:

$$H = 2O \Leftrightarrow p_{CO_2} = p_{CH_4}, \quad (1.4)$$

$$12C = 2O + 3H \Leftrightarrow p_{CO_2} = p_{H_2O}, \quad (1.5)$$

$$12C = 6O + H \Leftrightarrow p_{H_2O} = p_{CH_4}. \quad (1.6)$$

Esta clasificación se apoya en balances atómicos y en una partición estequiométrica simplificada, por lo que las fronteras (1.1)–(1.3) y las igualdades (1.4)–(1.6) aparecen como rectas en el diagrama H–C–O. En consecuencia, el triángulo H–C–O actúa como un marco elemental mínimo de composición que permite situar y comparar resultados de modelos más completos sin introducir supuestos adicionales.

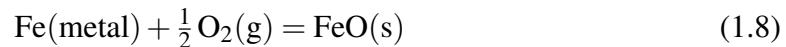
1.4. Fugacidad de oxígeno (f_{O_2})

La fugacidad de oxígeno, f_{O_2} , cuantifica el estado redox de un sistema, entendido como su grado de oxidación o reducción; esto describe la tendencia de las especies a aceptar o donar electrones y, en petrología geoquímica, se expresa como la disponibilidad efectiva de O_2 para participar en reacciones de oxidación–reducción (Liggins et al., 2022). Termodinámicamente, se define a partir del potencial químico:

$$\mu_{O_2}(T, P) = \mu_{O_2}^\circ(T) + RT \ln f_{O_2} \quad (1.7)$$

y, en mezclas gaseosas diluidas, $f_{O_2} \approx p_{O_2}$.

Un *buffer redox* es un ensamblaje de fases en equilibrio que fija un valor específico de f_{O_2} a una T y P dadas; cualquier sistema que coexista con dicho ensamblaje tenderá a ese valor de fugacidad. El *buffer IW* (*iron–wüstite*, por sus siglas en inglés; hierro–wüstita en español) se define por el equilibrio entre hierro metálico y wüstita (FeO):



Cuando Fe y FeO coexisten a una temperatura y presión dadas, ese ensamblaje fija un valor específico de f_{O_2} , que se toma como referencia para expresar la condición redox de un sistema mediante

$$\Delta IW \equiv \log_{10} f_{O_2} - \log_{10} f_{O_2}(\text{IW}; T, P) \quad (1.9)$$

Así, $\Delta IW > 0$ indica un medio más oxidante que IW y $\Delta IW < 0$ uno más reductor; la comparación debe realizarse siempre a la misma T y P . IW es una referencia extendida debido a la abundancia de hierro en materiales planetarios y a la robustez de su calibración.

Desde el punto de vista de la especiación, un aumento de f_{O_2} favorece especies más oxidadas (p.ej., CO_2 , SO_2 , Fe^{3+}), mientras que una disminución favorece especies reducidas (p.ej., CH_4 , CO , H_2 , H_2S , Fe^{2+}). Por ello, f_{O_2} se utiliza como descriptor compacto del entorno redox que condiciona la química C–H–O–S en magmas y gases.

1.5. Métodos de observación de atmósferas en exoplanetas rocosos

El estudio de las atmósferas de exoplanetas rocosos constituye un desafío considerable debido a la débil señal atmosférica en comparación con la intensa luz de sus estrellas anfitrionas (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Sin embargo, se han desarrollado varias técnicas para observar y caracterizar estas atmósferas.

- **Espectroscopía de Tránsito:** Se observa el sistema estelar antes, durante y después de que el planeta pase frente a su estrella, y se comparan los espectros obtenidos en cada momento (Madhusudhan, 2019). Durante el tránsito, una pequeña fracción de la luz estelar atraviesa el borde de la atmósfera del planeta y queda parcialmente absorbida o dispersada por sus gases y aerosoles. Al analizar cómo cambia la profundidad del tránsito con la longitud de onda, se infieren rasgos característicos de la atmósfera, como la presencia de moléculas (por ejemplo, H₂O, CO₂, CO o CH₄), líneas atómicas de sodio y potasio, y pendientes asociadas a nubes o nieblas que pueden atenuar las señales (Wordsworth and Kreidberg, 2022; Charnay and Drossart, 2023). En planetas rocosos, la señal es muy tenue, por lo que resulta más favorable observar alrededor de estrellas pequeñas; aun así, la actividad estelar puede introducir efectos que deben corregirse en el análisis.
- **Eclipse Secundario:** El eclipse secundario ocurre cuando el planeta transita detrás de su estrella desde nuestra perspectiva, lo que bloquea temporalmente la luz reflejada y emitida por el planeta (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Comparando la luz estelar antes y durante el eclipse, es posible determinar la cantidad de luz que proviene del planeta y, en consecuencia, inferir información sobre su temperatura y albedo (Charnay and Drossart, 2023). Esta técnica es particularmente útil para estudiar las propiedades térmicas y la composición de la atmósfera del planeta (Wordsworth and Kreidberg, 2022).
- **Curvas de fase:** Las curvas de fase son observaciones continuas de la luz emitida por un sistema estrella-planeta a lo largo de todo el ciclo orbital del planeta (Madhusudhan, 2019). Estas observaciones permiten analizar las variaciones en el brillo del planeta a medida que cambia su posición relativa con respecto a la estrella y a la Tierra (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Las curvas de fase proporcionan información sobre la distribución del calor en la superficie y la atmósfera del planeta (Madhusudhan, 2019).
- **Imagen directa:** La imagen directa es una técnica que busca observar directamente la luz emitida o reflejada por el planeta, separándola de la luz de la estrella anfitriona (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Este método presenta un desafío

considerable debido al alto contraste y la pequeña separación angular entre el planeta y la estrella (Ostberg et al., 2023). Sin embargo, es posible obtener imágenes directas de exoplanetas y estudiar sus atmósferas (Madhusudhan, 2019). La imagen directa es más efectiva para exoplanetas que están más distantes de sus estrellas y para aquellos que son brillantes en el infrarrojo (Wordsworth and Kreidberg, 2022).

- **Espectroscopía de alta resolución:** La espectroscopía de alta resolución permite detectar y analizar las líneas de absorción y emisión individuales de diferentes moléculas en la atmósfera de un exoplaneta (Madhusudhan, 2019). Al observar el espectro con una alta resolución, se puede distinguir entre la luz del planeta y la de la estrella anfitriona, mejorando la relación señal-ruido (Wordsworth and Kreidberg, 2022). Esta técnica es útil para estudiar la composición química detallada y la dinámica de la atmósfera planetaria (Madhusudhan, 2019).

1.6. Observación de atmósferas planetarias

1.6.1. Telescopio Espacial James Webb (JWST)

El *James Webb Space Telescope (JWST)* es actualmente el instrumento más sensible para la caracterización espectroscópica de atmósferas exoplanetarias en el infrarrojo. Está equipado con instrumentos como el Espectrógrafo de Infrarrojo Cercano (*Near-Infrared Spectrograph*, NIRSpec) y el Instrumento de Infrarrojo Medio (*Mid-Infrared Instrument*, MIRI), que cubren aproximadamente los rangos de $0.6\text{--}5\ \mu\text{m}$ y $5\text{--}28\ \mu\text{m}$, respectivamente (Wordsworth and Kreidberg, 2022; Alderson et al., 2023b). Estos intervalos espectrales incluyen las principales bandas de absorción de moléculas relevantes para atmósferas secundarias ricas en volátiles, como H_2O , CO_2 , CH_4 y SO_2 , que presentan firmas destacadas en el infrarrojo cercano y medio (Pontoppidan et al., 2022).

En espectroscopía de transmisión, el *JWST* registra la variación de la profundidad de tránsito en función de la longitud de onda mientras el exoplaneta pasa por delante de su estrella. Durante el tránsito, parte de la luz estelar atraviesa la atmósfera del planeta y es absorbida o dispersada por las especies gaseosas presentes. Al repetir estas observaciones en múltiples tránsitos, la señal se integra y la relación señal-ruido mejora aproximadamente como $\sqrt{N_{\text{tr}}}$, permitiendo alcanzar precisiones del orden de decenas a cientos de ppm en la profundidad de tránsito diferencial para sistemas favorables (Batalha et al., 2018). La descomposición de la luz capturada en un espectro revela estructuras de absorción características, desde las bandas de CO_2 en $\sim 4.3\ \mu\text{m}$ hasta las bandas de SO_2 en el infrarrojo medio ($7\text{--}9\ \mu\text{m}$), cuya amplitud y forma dependen de la composición, la temperatura y la altura de escala de la atmósfera (Beichman et al., 2014; Wordsworth and Kreidberg, 2022). Este marco observacional establece el contexto para evaluar la

detectabilidad de gases volcánicos con los modos de NIRSpec y MIRI considerados en este trabajo.

2. Planteamiento del problema

La detección de actividad volcánica en exoplanetas rocosos representa actualmente un desafío observacional significativo (Wordsworth and Kreidberg, 2022). El modelamiento de sus interiores planetarios debe apoyarse en métodos indirectos, tales como la determinación de masas y radios, así como la eventual detección de sus atmósferas (Seager and Lissauer, 2010; Ostberg et al., 2023). No obstante, el vulcanismo constituye un proceso fundamental en la formación y el mantenimiento de atmósferas, ya que controla la abundancia de gases como H_2O , CO_2 , CH_4 y SO_2 .

La intensa actividad convectiva en el interior de exoplanetas rocosos puede generar condiciones favorables para el establecimiento de regímenes tectónicos análogos a la tectónica de placas (Valencia et al., 2007). Si bien esta actividad tectónica crearía condiciones propicias para un posible vulcanismo, su presencia no constituye, por sí sola, evidencia concluyente de actividad volcánica en exoplanetas rocosos. Para evaluar esta hipótesis, resulta necesario integrar modelos estructurales del interior de exoplanetas rocosos con modelos de evolución atmosférica y predicciones espectroscópicas, que describan cuantitativamente cómo la desgasificación volcánica modifica la composición atmosférica y las firmas de gases potencialmente accesibles al Telescopio Espacial James Webb (JWST) (Kaltenegger et al., 2010).

En este contexto, aún se desconoce con detalle cómo evoluciona la composición de atmósferas dominadas por desgasificación volcánica en exoplanetas rocosos bajo distintas condiciones de masa y estado redox del manto planetario, y qué configuraciones generan firmas espectrales de gases volcánicos detectables con el JWST. En consecuencia, el análisis de la evolución de estos gases en atmósferas de exoplanetas rocosos se plantea como una estrategia viable para inferir indirectamente la posible actividad volcánica y avanzar en la caracterización de los procesos geológicos que podrían ocurrir en exoplanetas rocosos (Wordsworth and Kreidberg, 2022; Ostberg et al., 2023).

3. Objetivos

3.1. Objetivo general

Analizar la evolución de los gases de origen volcánico en las atmósferas de exoplanetas rocosos.

3.2. Objetivos específicos

1. Estudiar y aplicar el código *EVolve* (Liggins et al., 2022) explorando sistemáticamente el espacio de parámetros planetarios para caracterizar posibles exoplanetas rocosos mediante simulaciones.
2. Determinar las composiciones atmosféricas originadas por la desgasificación volcánica en exoplanetas rocosos y compararlas con los tipos de atmósferas definidos en Woitke et al. (2021).
3. Cuantificar el efecto de la masa planetaria ($1-10 M_{\oplus}$) sobre la desgasificación y la composición atmosférica resultante en exoplanetas rocosos.
4. Analizar la capacidad del *Telescopio Espacial James Webb* para detectar gases volcánicos en las atmósferas de exoplanetas rocosos.

4. Metodología

En esta sección se describen los procedimientos metodológicos implementados para dar respuesta a los objetivos específicos del estudio, los cuales son: (1) determinar las composiciones atmosféricas originadas por la desgasificación volcánica en exoplanetas rocosos y contrastarlas con los tipos de atmósferas definidos por (Woitke et al., 2021); (2) cuantificar el efecto de la masa planetaria ($1-10M_{\oplus}$) sobre la desgasificación y la composición atmosférica resultante; y (3) analizar la capacidad del Telescopio Espacial James Webb (JWST) para detectar gases de origen volcánico en las atmósferas de exoplanetas rocosos.

4.1. Introducción a EVOlve

En este trabajo se empleó el código abierto EVOlve, desarrollado en el trabajo doctoral de (Liggins et al., 2022) y disponible públicamente.

EVOlve es un código para modelar atmósferas secundarias, es decir, atmósferas que se generan y se modifican por la desgasificación del interior planetario, los aportes por impactos y la interacción con la superficie (Liggins et al., 2022). El modelo integra: (i) fusión parcial del manto y exsolución de volátiles, (ii) desgasificación mediante el submodelo EVO (Liggins et al., 2020), y (iii) especiación en equilibrio termoquímico con FastChem (Stock et al., 2022a). Dados parámetros planetarios iniciales (masa, radio y gravedad), condiciones redox del manto (expresadas como fugacidad de oxígeno relativa a buffers tipo IW), abundancias de H–C–S–N en la composición del manto y una temperatura atmosférica de referencia, el sistema calcula las abundancias de los gases emitidos y su composición.

4.2. Pasos generales de configuración de EVOlve

(1) Fusión del manto y exsolución de volátiles. Se fija el estado redox del manto (ΔIW) y se asume que es constante. En cada paso temporal, una fracción F del manto se funde a una tasa M_{melt} . Las abundancias del volátil i en el fundido se calculan por fusión en lote:

$$X_{i,\text{melt}} = \frac{X_{i,\text{mantle}}}{D_i + F(1 - D_i)} \quad (4.1)$$

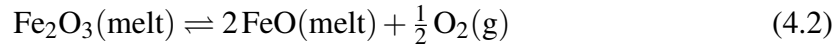
donde D_i son coeficientes de partición (dependientes de fO_2 cuando corresponda). Usamos $D_H = 0.01$ (Aubaud et al., 2004) y $D_S = 0.01$ (Callegaro et al., 2020); para C (carbono) se aplica (Rosenthal et al., 2015) si el sistema está subsaturado en grafito y (Li et al., 2017) cuando está saturado (se conmuta en el cruce de ambas leyes); para N (nitrógeno) se interpola entre los valores a IW y NNO de (Li et al., 2013). Una fracción fija del magma, $r_{\text{ei}} = 0.1$, alcanza la superficie y desgasifica ($M_{\text{ext}} = r_{\text{ei}} \Delta t M_{\text{melt}}$) (Crisp, 1984; Ortenzi et al., 2020); luego, el fundido extrusivo residual y el intrusivo se reincorporan al manto, y las abundancias del manto se actualizan por un balance de masas simple. Así, ΔIW controla qué fracción de C y N pasa al fundido y condiciona, en el módulo siguiente, las especies gaseosas liberadas.

(2) Desgasificación con EVO. EVO estima la composición y la abundancia de los gases que libera un magma ascendente a una temperatura fija del magma (1473 K) y

para un estado redox dado (ΔIW). El sistema C–O–H–S–N se considera con diez especies (H_2O , H_2 , O_2 , CO_2 , CO , CH_4 , S_2 , SO_2 , H_2S y N_2).

Primero, con las concentraciones disueltas de C, H, S y N en el fundido, se determina la presión de saturación P_{sat} aplicando leyes de solubilidad para un fundido basáltico e imponiendo el cierre $\sum_i P_i - P = 0$, donde P es la presión total y P_i las presiones parciales consistentes con cada ley (Holloway, 1987; Liggins et al., 2020).

A partir de P_{sat} y a medida que la presión disminuye hasta la presión superficial (manteniendo T_{magma} constante), el modelo resuelve simultáneamente: (i) los equilibrios homogéneos en fase gaseosa que distribuyen C, H, O, S y N entre las diez especies; (ii) los equilibrios gas–fundido mediante leyes de solubilidad para H_2O y H_2 (Burgisser et al., 2015), CO_2 (Eguchi and Dasgupta, 2018), CO (Armstrong et al., 2015), CH_4 (Ardia et al., 2013), N_2 Libourel et al. (2003) y S_2 a partir de la capacidad de sulfuro (O’Neill, 2021) (CO y CH_4 se consideran insolubles si $\Delta IW > +1$); y (iii) el intercambio redox gas–fundido,



que mantiene el equilibrio de fO_2 entre el gas y el magma (Kress and Carmichael, 1991). En todo momento se conservan las abundancias elementales totales del sistema (gas + fundido). La salida del módulo es la *abundancia* total de gas emitido y su *especiación* instantánea, que se emplean como entrada para el modelo atmosférico.

(3) Procesamiento atmosférico con FastChem. El gas volcánico calculado en el módulo de desgasificación se mezcla con la atmósfera preexistente mediante un balance de materia a nivel elemental (C, H, O, S, N). A partir de esta atmósfera mixta, se actualiza la presión superficial como

$$P_j = P_{j-1} + \frac{M_{ext} W_g g}{4\pi R_p^2} \quad (4.3)$$

donde P_{j-1} es la presión superficial previa, M_{ext} la masa de fundido extruido en el paso, W_g la fracción en peso del gas exhalado en el sistema volcánico, g la gravedad superficial y R_p el radio planetario.

Con las nuevas abundancias elementales y P_j , FastChem 2.0 (Stock et al., 2018, 2022a) calcula la especiación en equilibrio termoquímico a la temperatura atmosférica fijada. El cálculo incluye el conjunto completo de 85 especies que maneja FastChem, por lo que puede formar especies adicionales a las consideradas en el módulo volcánico.

4.3. Exploración del espacio de parámetros

Con el funcionamiento de EVOlve establecido, se realizó un barrido sistemático de parámetros para identificar la sensibilidad del modelo y cuantificar el efecto de cada control sobre las variables de salida. Inicialmente, se exploró la sensibilidad a la temperatura atmosférica de referencia, con $T_{\text{atm}} = \{600, 800, 1000\}$ K, para comparar las trayectorias de evolución. Luego, se variaron las abundancias iniciales de volátiles en el manto, definiendo escenarios con razones $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ diferentes. Además, se evaluó el efecto del estado redox del manto mediante un barrido en ΔIW .

4.4. Estudiando los tipos atmosféricos que existen

Concluidas las simulaciones, se clasifica el estado atmosférico final según (Woitke et al., 2021) para contextualizar los resultados obtenidos. Esta clasificación, derivada de modelos de equilibrio químico para el sistema H–C–O–N, identifica tres regímenes composicionales frente a variaciones moderadas de T , P y del contenido de N. Las atmósferas de *tipo A* están dominadas por H_2O , CH_4 y NH_3 con H_2 (o N_2) y sólo trazas de CO_2 y O_2 ; las de *tipo B*, por O_2 , H_2O , CO_2 y N_2 , con trazas de CH_4 , NH_3 y H_2 ; y las de *tipo C*, por H_2O , CO_2 , CH_4 y N_2 , con trazas de NH_3 , H_2 y O_2 . Con esta base, la clasificación ofrece un marco comparativo directo para interpretar las composiciones finales simuladas y discutir posibles sesgos observacionales y ambigüedades en biomarcadores basados en la coexistencia CH_4+CO_2 .

4.5. Comparación con 10 masas terrestres

Se replicó el barrido paramétrico anterior para un planeta con $M = 10M_{\oplus}$. Para este conjunto se actualizaron R_p y g según la relación masa–radio adoptada, y se escaló la cantidad de material fundido M_{melt} , de modo que la sistematización en las simulaciones anteriores se repitió bajo la condición de $10M_{\oplus}$.

La clasificación composicional del estado final (tipos A/B/C) se aplicó con el mismo procedimiento descrito en la subsección anterior y se registró para su comparación directa. De este modo, cualquier diferencia entre los resultados de 1 y $10M_{\oplus}$ refleja el efecto de la masa planetaria bajo condiciones estrictamente equivalentes.

4.6. Evaluación de la observabilidad

Con el fin de evaluar la observabilidad de las especies volcánicas predichas por las simulaciones, se implementó un esquema de cálculo que conecta directamente la composición atmosférica final con la señal esperada en transmisión para un sistema análogo a TRAPPIST-1.

En primer lugar, a partir de la composición atmosférica final de cada simulación, se determinó el peso molecular medio μ y, a partir de él, la altura de escala atmosférica H , asumiendo una atmósfera isotérmica y en equilibrio hidrostático:

$$H = \frac{k_B T_{\text{atm}}}{\mu g} \quad (4.4)$$

donde T_{atm} es la temperatura atmosférica característica, g la gravedad superficial del planeta y k_B la constante de Boltzmann ($1.380649 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$), que relaciona la energía térmica por partícula con la temperatura. Esta magnitud fija el grosor vertical efectivo de la atmósfera que contribuye a la señal en transmisión.

En segundo lugar, se tradujo esta estructura vertical en una señal observable en la transmisión. La amplitud de la señal en transmisión debida a la atmósfera, ΔD , se estimó como:

$$\Delta D \approx N_H \frac{2R_p H}{R_*^2} \quad (4.5)$$

donde R_p es el radio planetario, R_* el radio estelar y N_H el número efectivo de alturas de escala que contribuyen a la señal, la cual cuantifica la extensión vertical de la porción de atmósfera muestreada por las bandas moleculares en transmisión.

En tercer lugar, para cada gas de interés (SO_2 , CO_2 , CH_4 , H_2S) se seleccionaron las ventanas espectrales y modos instrumentales de JWST más apropiados: MIRI LRS para las bandas de SO_2 en $7\text{--}9 \mu\text{m}$ y NIRSpec para CO_2 y CH_4 en $3\text{--}5 \mu\text{m}$. Para cada configuración instrumental se adoptó un nivel de ruido por canal espectral, σ_{bin} , y se evaluó el número de canales independientes N_{bins} que cubren la banda diagnóstica de cada especie.

En cuarto lugar, la razón señal-ruido en un tránsito individual se calculó como:

$$\text{SNR}_1 = \frac{\Delta D}{\sigma_{\text{bin}}} \sqrt{N_{\text{bins}}} \quad (4.6)$$

donde ΔD es la amplitud de absorción estimada en la ecuación 4.5. Finalmente, el

número de tránsitos necesarios para alcanzar una detección a 5σ se obtuvo mediante:

$$N_{\text{tr}} = \left(\frac{5}{\text{SNR}_1} \right)^2 \quad (4.7)$$

Este procedimiento proporciona, para cada simulación y para cada especie volcánica, una estimación directa de la viabilidad observacional con JWST, conectando de forma consistente la composición atmosférica, la estructura vertical y las restricciones instrumentales.

5. Resultados

En esta serie de simulaciones, se fijaron parámetros terrestres para la masa ($M_p = 1 M_{\oplus}$) y el radio ($R_p = 1 R_{\oplus}$), junto con condiciones internas de referencia: temperatura de formación de fundidos $T_{\text{melt}} = 1473.15 \text{ K}$, masa del manto $M_{\text{manto}} = 4.01 \times 10^{27} \text{ g}$, y tasa de material fundido $= 3.3 \times 10^9 \text{ m}^3 \text{ yr}^{-1}$. Las variables diferentes a los parámetros terrestres fueron la temperatura superficial $T = 1000 \text{ K}$, la presión superficial inicial $P = 0.01 \text{ bar}$ y la composición inicial de hidrógeno puro ($mmw = 2.016 \text{ g mol}^{-1}$, con $\text{H}_2 = 1 \text{ mol}$). La fugacidad de oxígeno se expresa como ΔIW y no se consideró constante entre casos; en su lugar, se exploró un barrido de valores de ΔIW que abarca desde condiciones reductoras ($\Delta IW < 0$) hasta oxidantes ($\Delta IW > 0$). La Tabla 5.1 detalla la composición de volátiles del manto utilizada en cada evolución; es decir, las abundancias iniciales de H_2O , CO_2 , S y N (en ppm) que se mantienen constantes dentro de cada evolución mientras se varía ΔIW . Cada fila define un escenario inicial distinto para la exsolución y la relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$.

5.1. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar

Como se mencionó anteriormente, el código requiere una composición mantélica inicial, donde se establece la abundancia de volátiles en ppm. El conocimiento actual es escaso respecto a la composición química que tienen los exoplanetas rocosos en su manto; por lo tanto, se parte de conocimientos teóricos. En esta primera parte, se asume un valor igual al propuesto en (Liggins et al., 2022), el cual se observa en la Tabla 5.1.

La Figura 5.1 representa el resultado de la evolución final de la atmósfera después de 1 Gyr. De la gráfica se pueden analizar varios puntos; primero, el límite del eje Y se estableció en 10^{-9} porque este es uno de los límites que tienen telescopios como el JWST.

Tabla 5.1

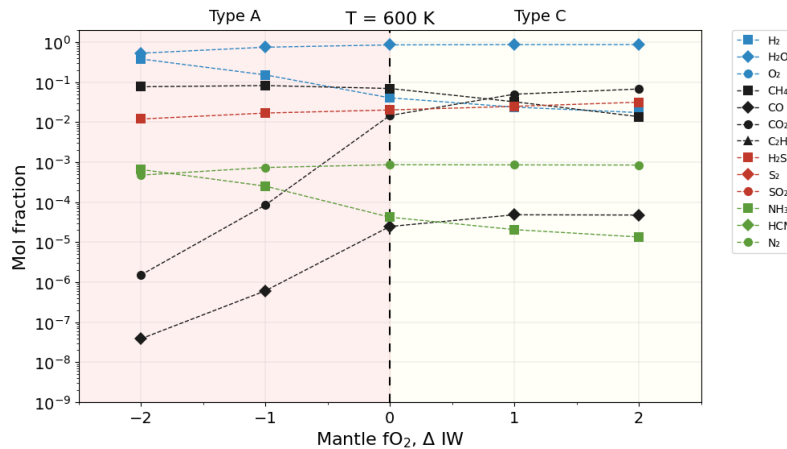
Composición de volátiles en el manto adoptada como condición inicial para cada evolución numérica.

| | H ₂ O | CO ₂ | S | N | fO ₂ (min) | fO ₂ (max) | H ₂ O/CO ₂ |
|---|------------------|-----------------|-----|------|-----------------------|-----------------------|----------------------------------|
| ■ | 410 | 58 | 62 | 0.41 | -2 | 2 | Estándar |
| ◆ | 300 | 300 | 62 | 0.41 | -2 | 2 | 1.00 |
| ▲ | 100 | 200 | 62 | 0.41 | -2 | 1 | 0.50 |
| ● | 400 | 200 | 214 | 1.43 | -1 | 6 | 2.00 |

Nota. Composición inicial de volátiles (ppm) y rango redox explorado (en ΔIW). La primera columna muestra el símbolo usado para identificar cada caso. Se muestran las concentraciones de H₂O, CO₂, S y N (en ppm), el intervalo de fugacidad de oxígeno explorado (fO₂(min) – fO₂(max), en ΔIW) y la razón H₂O/CO₂. Las cuatro filas corresponden, respectivamente, a: (i) un caso estándar con (H₂O/CO₂ \approx 7); (ii) un caso con H₂O/CO₂ = 1; (iii) un caso con H₂O/CO₂ = 0.5; y (iv) un caso con H₂O/CO₂ = 2 y mayores contenidos de S y N, para el cual se extendió el barrido redox hasta $\Delta IW = +6$.

Figura 5.1.

Evolución atmosférica a 600 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar.



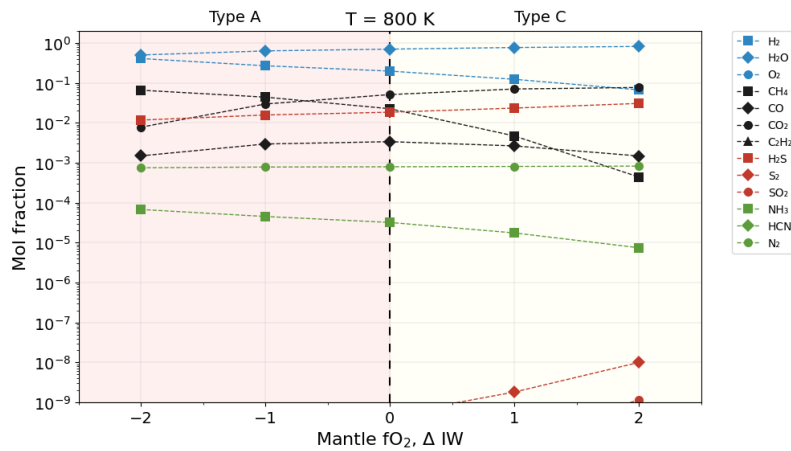
Las moléculas que no se observan tienen una abundancia menor a este límite. El eje Y representa la abundancia molecular y el eje X la fugacidad del oxígeno. En esta gráfica, la temperatura se mantiene constante y es un valor de 600 K. El color de fondo representa el tipo de atmósfera que se obtiene, que en este caso corresponde a los tipos A y C; el valor $IW=0$ marca este límite entre estas dos atmósferas. En un valor cercano a 1 en la fugacidad

del oxígeno, se observa un cambio en la abundancia entre CH_4 y CO_2 .

En la Figura 5.2 se puede observar que el intercambio entre CH_4 y CO_2 ocurre mucho antes; esto se debe a que la abundancia de CH_4 disminuye cuando aumenta la temperatura (Woitke et al., 2021). El intercambio ocurre aproximadamente en -1 de fugacidad del oxígeno.

Figura 5.2.

Evolución atmosférica a 800 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar.



La Figura 5.3 corresponde a la última temperatura, que tiene un valor de 1000 K. A esta temperatura, se observa un mayor decrecimiento de CH_4 , y el intercambio con el CO_2 ya no se logra observar dentro de los intervalos de IW.

En el triángulo de la Figura 5.4 se observa la evolución temporal en función de las abundancias elementales. De izquierda a derecha, se encuentra la evolución temporal; es decir, el punto más a la izquierda representa los primeros años de evolución y el último punto a la derecha corresponde al valor de 1 Gyr. Cada color corresponde a un valor de fugacidad diferente. Algo muy importante que se observa dentro de los resultados es que, a pesar de que a diferentes temperaturas se produzca una diferencia en la evolución molecular, hay una constante en la abundancia elemental, ya que con las tres temperaturas se observa el mismo resultado. En la gráfica, podemos ver que la fugacidad igual a cero es el límite entre una atmósfera tipo A y una tipo C.

Figura 5.3.

Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar.

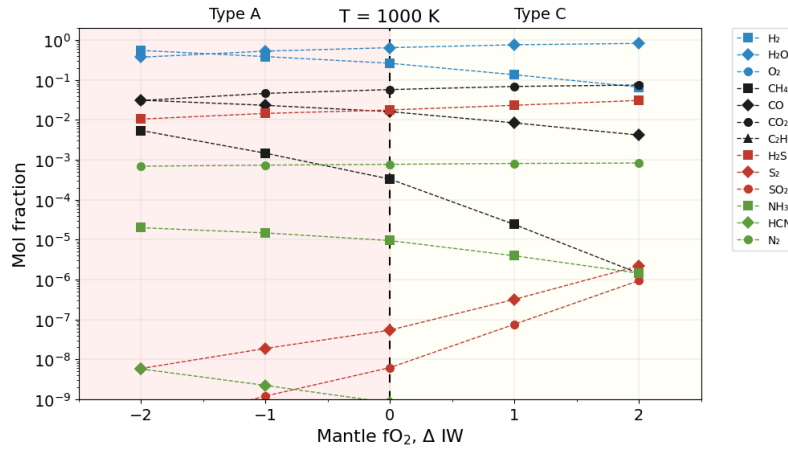
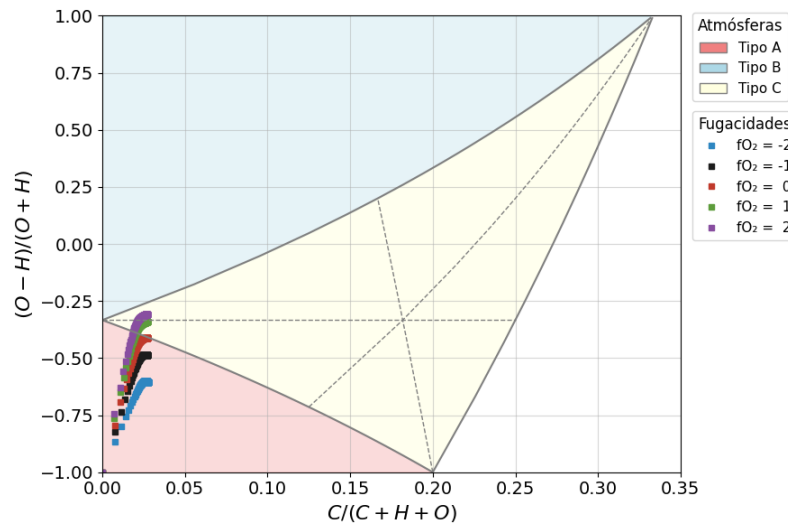


Figura 5.4.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y composición mantélica estándar.



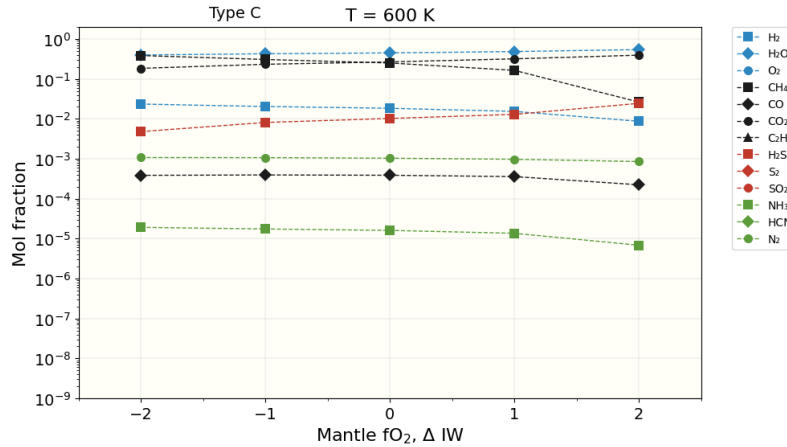
5.2. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H₂O/CO₂ igual a 1 en el manto

Lo que procedemos a hacer en esta parte del trabajo es realizar un barrido de las posibles relaciones H₂O/CO₂ que pueden existir. En este caso, asumimos una relación

H_2O/CO_2 igual a 1 y se explora con las mismas tres temperaturas del ejercicio anterior.

Figura 5.5.

Evolución atmosférica a 600 K, para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto.



En este caso, se realizó el mismo procedimiento anterior, pero con la nueva composición. En la Figura 5.5 se puede observar que, para todos los valores de fugacidad, el tipo de atmósfera que se obtiene es del tipo C. Para una temperatura de 600 K, el intercambio entre CH_4 y CO_2 ocurre con un valor de IW igual a cero. Además, se observa una mayor abundancia de CO_2 . Con 800 K, como se observa en la Figura 5.6, el intercambio entre CH_4 y CO_2 ocurre en $\Delta -1$. Con 1000 K, el intercambio entre CH_4 y CO_2 ocurre en -2 , y se puede observar en la Figura 5.7 una mayor cantidad de moléculas de azufre. Nuevamente se observa una menor concentración de CH_4 a esta temperatura.

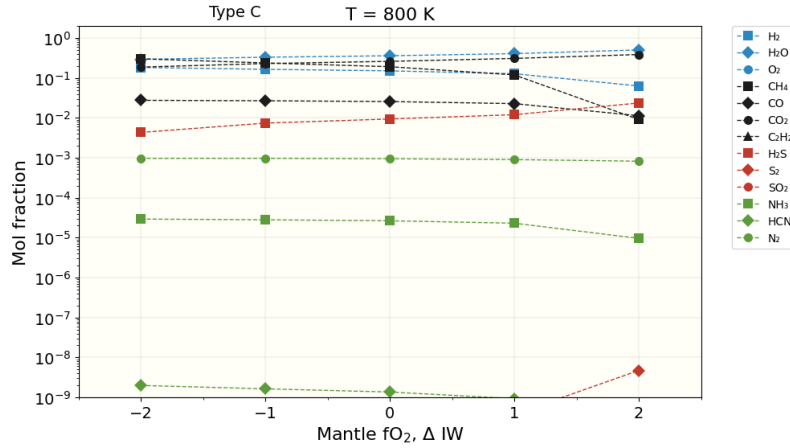
En el diagrama triangular de la Figura 5.8, observamos la evolución atmosférica con cada una de las distintas fugacidades; se puede ver que al inicio la atmósfera es tipo B, pero rápidamente evoluciona a atmósfera tipo C. Nuevamente se comprueba que, para las tres temperaturas, a pesar de tener una abundancia molecular diferente, las abundancias elementales se mantienen constantes.

5.3. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto

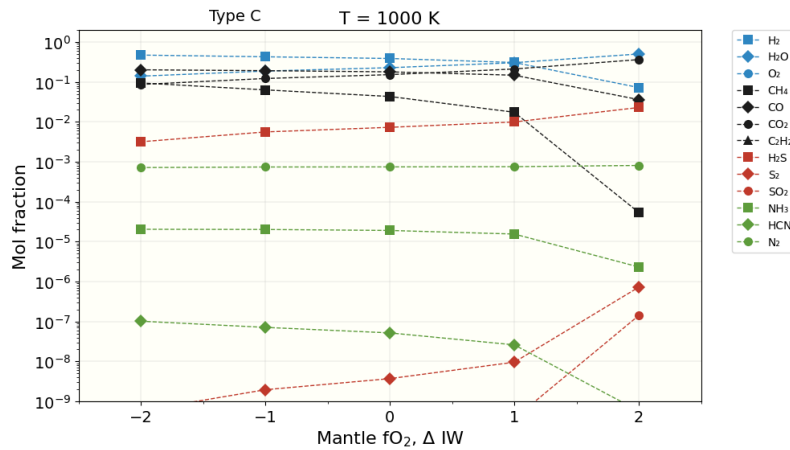
A partir de este momento, como evidenciamos que la temperatura no afecta la abundancia elemental, se realizaron las simulaciones solamente con una temperatura; se

Figura 5.6.

Evolución atmosférica a 800 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ igual a 1 en el manto.

**Figura 5.7.**

Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ igual a 1 en el manto.

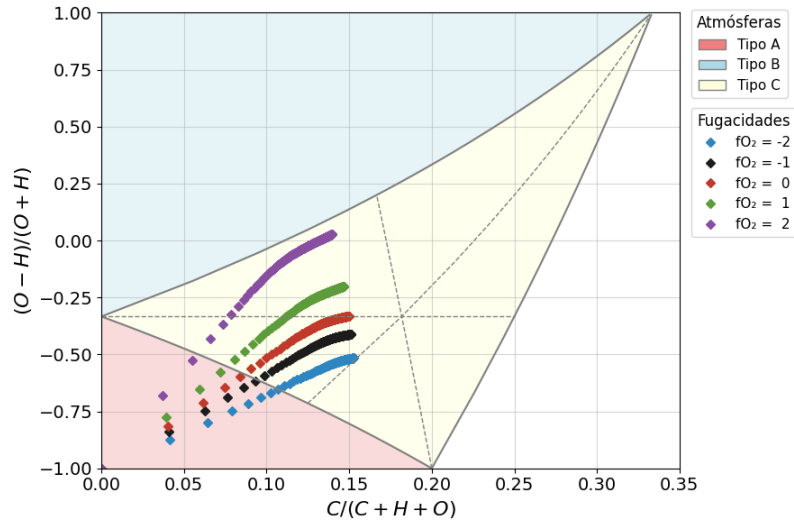


escogió la temperatura de 1000 K (Figura 5.9) por ser una temperatura estándar entre planetas rocosos calientes (Paragas et al., 2025).

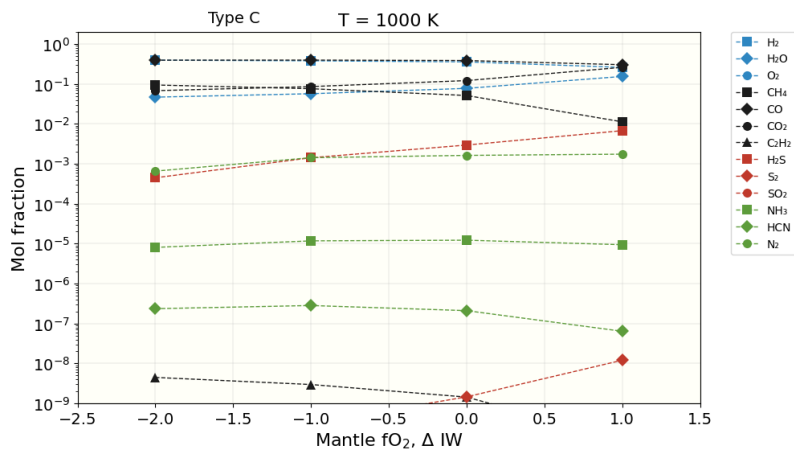
Con esta composición se observa una mayor abundancia de CO . El intercambio entre CH_4 y CO_2 ocurre alrededor de -1 de valor de fugacidad. También se evidencia una mayor abundancia de H_2S . Algo importante a resaltar es que no fue posible realizar las

Figura 5.8.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto.

**Figura 5.9.**

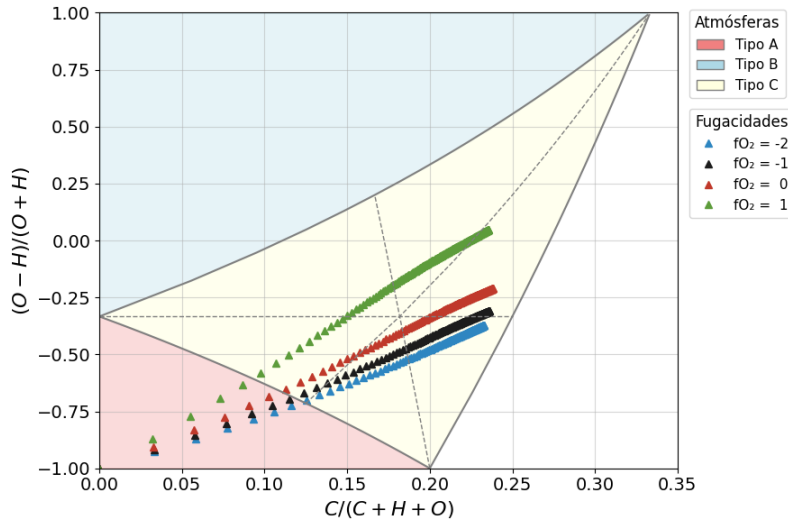
Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto.



simulaciones para un valor de fugacidad igual a 2, porque se presentaron fallos. Con este valor de fugacidad y esta composición en el manto, se presentan inestabilidades en las reacciones químicas (Stock et al., 2018).

Figura 5.10.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto.



En el triángulo de la Figura 5.10 se puede observar que no se encuentra el valor de la fugacidad de 2. También se observa que nuevamente las atmósferas que se obtienen comienzan con un tipo B y terminan formando un tipo C. Además, se puede notar una mayor abundancia de C, reflejada en el desplazamiento de los puntos hacia la derecha del diagrama.

5.4. Evolución atmosférica de un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto

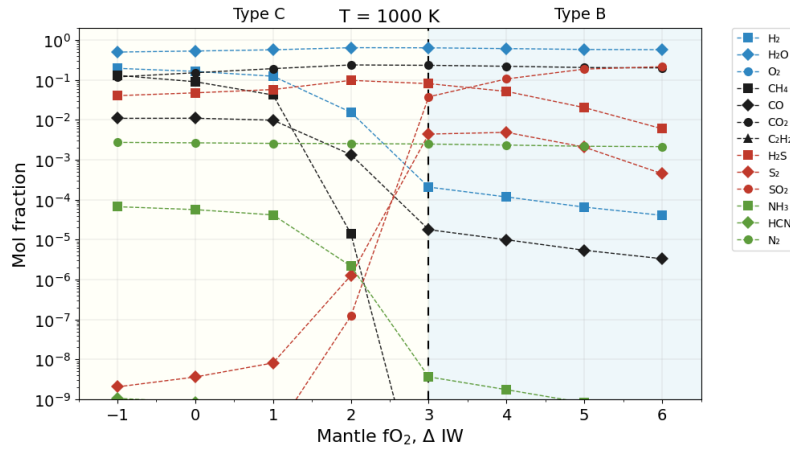
En esta sección se estableció una relación de 2 entre H_2O/CO_2 , y además, se mantuvo una proporción equivalente para el S y el N. Esto permitió tener un mayor rango dentro de la fugacidad del oxígeno.

En la Figura 5.11 se observa una mayor variabilidad de moléculas, con mayor contenido en S. Aproximadamente a 3 de fugacidad de oxígeno, la atmósfera evoluciona de tipo C a tipo B. Se observa una disminución considerable del H_2 , en comparación con las simulaciones anteriores.

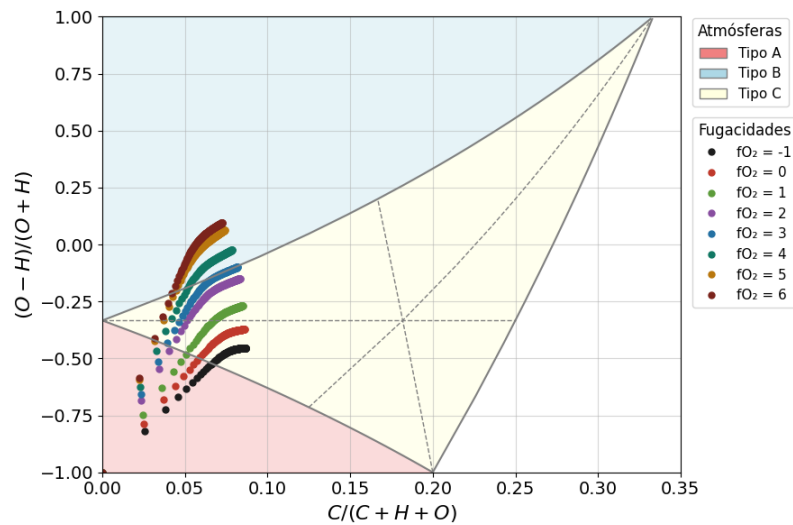
En el triángulo de la Figura 5.12 se puede observar la evolución atmosférica; algo

Figura 5.11.

Evolución atmosférica a 1000 K para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto.

**Figura 5.12.**

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto.



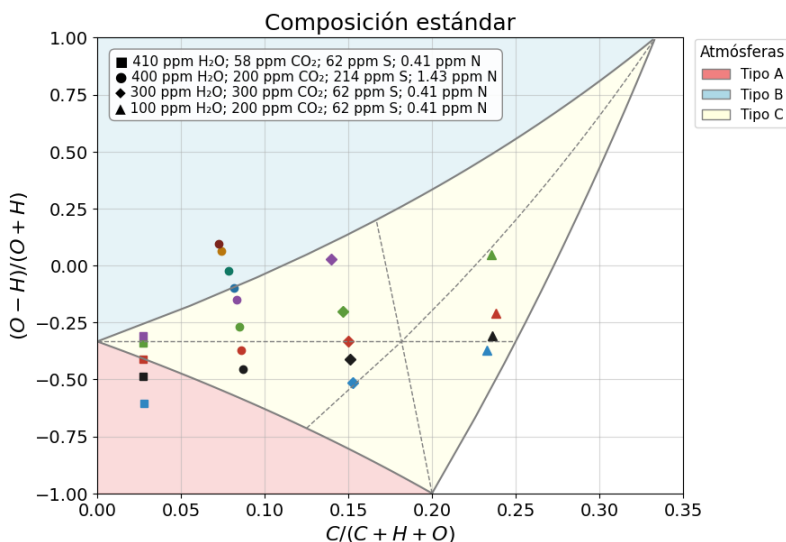
importante a resaltar es que, por primera vez, se lograron alcanzar valores altos de oxígeno para una atmósfera tipo B. También se observa la mayor cantidad de fugacidades que se han simulado hasta el momento.

5.5. Evolución atmosférica final

Esta sección presenta el estado final alcanzado por cada simulación. El punto final de cada trayectoria de evolución atmosférica define la clase de atmósfera conforme a (Woitke et al., 2021); por ello, se destacan explícitamente estos estados finales, que servirán de referencia para comparaciones y futuras clasificaciones.

Figura 5.13.

Evolución final de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y distintas relaciones H_2O/CO_2 en el manto.



5.5.1. Composición doble

Se repitió el ejercicio multiplicando por dos las abundancias de las especies volátiles del manto respecto al caso base (Tabla 5.2), con el propósito de evaluar la sensibilidad del modelo y caracterizar las diferencias frente a las simulaciones previas. La Figura 5.14 resume todas las simulaciones finales que se hicieron en base a los parámetros establecidos en la Tabla 5.2.

Tabla 5.2

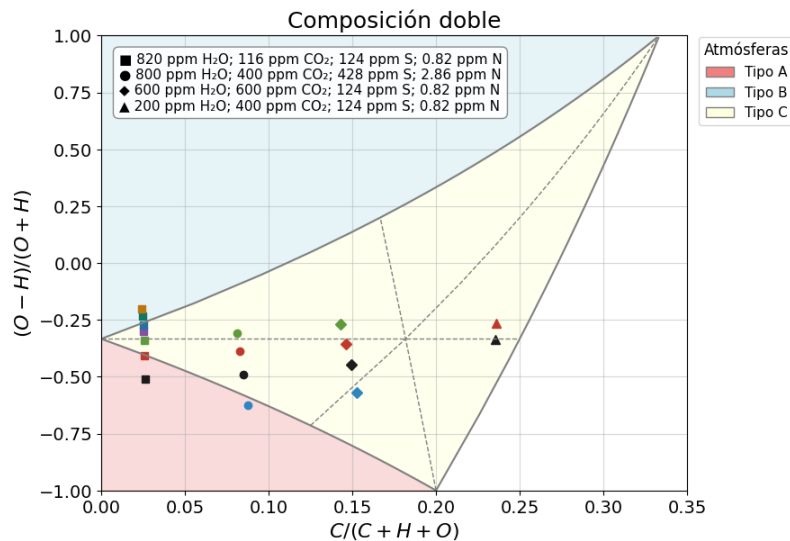
Composición del manto para cada evolución con abundancias de volátiles duplicadas respecto al caso estándar.

| | H ₂ O | CO ₂ | S | N | fO _{2min} | fO _{2max} | H ₂ O/CO ₂ |
|---|------------------|-----------------|-----|------|--------------------|--------------------|----------------------------------|
| ■ | 820 | 116 | 124 | 0.82 | -1 | 5 | Estándar |
| ◆ | 600 | 600 | 124 | 0.82 | -2 | 1 | 1.00 |
| ▲ | 200 | 400 | 124 | 0.82 | -1 | 0 | 0.50 |
| ● | 800 | 400 | 428 | 2.86 | -2 | 1 | 2.00 |

Nota. Composición mantélica con abundancias de volátiles duplicadas respecto al caso estándar. La primera columna muestra el símbolo usado para identificar cada caso.

Figura 5.14.

Evolución final de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 1 masa terrestre y el doble de las relaciones H₂O/CO₂ en el manto.



5.6. Material fundido en función de la masa planetaria

Para estimar de manera simplificada la cantidad de material fundido (*melt flux*) que puede producir un planeta rocoso en función de su masa, es común emplear relaciones de escalamiento derivadas de la física de la convección del manto. Estas aproximaciones parten de dos elementos principales: la relación masa–radio para supertierras y las leyes de transferencia de calor en convección.

Diversos estudios han mostrado que el radio de planetas rocosos con masas comprendidas entre 1 y 10 masas terrestres sigue una relación tipo potencia con la masa (Valencia et al., 2006; Seager et al., 2007; Cuartas-Restrepo, 2018), de la forma:

$$R \propto M^\beta, \quad \beta \approx 0.27 \quad (5.1)$$

5.6.1. *Derivación del escalamiento del flujo de calor y su relación con el melt flux*

El transporte de calor en el manto de un planeta rocoso está gobernado por la convección. La eficiencia de esta convección se describe mediante dos números adimensionales: el número de Rayleigh (Ra) y el número de Nusselt (Nu). El primero mide la relación entre fuerzas de flotabilidad y disipación viscosa, mientras que el segundo cuantifica el aumento en el transporte de calor convectivo respecto al puramente conductivo. El número de Rayleigh para un manto planetario puede expresarse como (Turcotte and Schubert, 2002):

$$Ra = \frac{\rho g \alpha_T \Delta T D^3}{\kappa \eta} \quad (5.2)$$

donde ρ es la densidad, g la gravedad superficial, α_T el coeficiente de expansión térmica, ΔT la diferencia de temperatura entre núcleo y superficie, D el espesor del manto, κ la difusividad térmica y η la viscosidad.

Para propósitos de escalamiento, se asume que los parámetros reológicos ($\rho, \alpha_T, \Delta T, \kappa, \eta$) no dependen fuertemente de la masa planetaria en el rango de interés (1–10 M_\oplus). De este modo, el número de Rayleigh se simplifica a:

$$Ra \propto g D^3 \quad (5.3)$$

La gravedad superficial escala como:

$$g = \frac{F}{m} = G \frac{M}{R^2} \propto \frac{M}{R^2} \propto M^{1-2\beta} \quad (5.4)$$

y el espesor del manto es proporcional al radio del planeta:

$$D \propto R \propto M^\beta \quad (5.5)$$

donde la relación masa–radio es $R \propto M^\beta$ con $\beta \approx 0.27$ para supertierras (Valencia et al., 2006; Seager et al., 2007). Sustituyendo, se obtiene:

$$Ra \propto M^{(1-2\beta)} \cdot M^{3\beta} = M^{1+\beta} \quad (5.6)$$

El número de Nusselt sigue la ley de escala convectiva:

$$Nu \propto Ra^\gamma \quad (5.7)$$

con $\gamma \approx 1/3$ en convección vigorosa (Turcotte and Schubert, 2002; Kite et al., 2009). Por tanto:

$$Nu \propto M^{\gamma(1+\beta)} \quad (5.8)$$

El flujo de calor medio por unidad de área se relaciona con el número de Nusselt como:

$$q = \frac{Nu k \Delta T}{D}, \quad (5.9)$$

donde k es la conductividad térmica. Si se considera $k\Delta T$ aproximadamente constante al variar la masa, entonces:

$$q \propto \frac{Nu}{D} \propto M^{\gamma(1+\beta)} \cdot M^{-\beta} = M^{\gamma+\beta(\gamma-1)} \quad (5.10)$$

Sustituyendo $\beta = 0.27$ y $\gamma = 1/3$, se obtiene:

$$q \propto M^{0.153} \quad (5.11)$$

El calor total transportado hacia la superficie se obtiene multiplicando el flujo medio por unidad de área (q) por la superficie esférica del planeta. Así:

$$Q_{\text{loss}} = q \cdot A \quad (5.12)$$

donde el área de un planeta esférico es

$$A = 4\pi R^2 \quad (5.13)$$

En términos de escalamiento, se tiene que $q \propto M^{0.153}$ y $R \propto M^\beta$. Sustituyendo estas dependencias en la expresión anterior:

$$Q_{\text{loss}} \propto q \cdot R^2 \propto M^{0.153} \cdot M^{2\beta} \quad (5.14)$$

Tomando $\beta = 0.27$, se obtiene:

$$Q_{\text{loss}} \propto M^{0.153+0.54} \approx M^{0.693} \quad (5.15)$$

Finalmente, al suponer que la producción de material fundido en el manto (*melt flux*) es proporcional a la cantidad de calor convectivamente transportado hacia la superficie, se llega a la expresión:

$$M_{\text{melt}}(M) = M_{\text{melt},\oplus} \left(\frac{M}{M_{\oplus}} \right)^{0.7} \quad (5.16)$$

donde $M_{\text{melt},\oplus}$ corresponde al valor de referencia terrestre, estimado en $3.3 \times 10^9 \text{ m}^3/\text{año}$ (Kite et al., 2009; Dorn et al., 2018; Brachmann et al., 2025).

Con esta ecuación se puede calcular el valor del material fundido en el manto para diferentes masas planetarias, cuyos resultados se resumen en la Tabla 5.3. Los valores presentados en esta tabla se representan gráficamente en la Figura 5.15, lo que permite visualizar con mayor claridad la tendencia creciente del material fundido con la masa planetaria.

5.6.2. Cálculo del *melt flux* para diferentes valores de masa planetaria

Se llevaron a cabo simulaciones con una composición inicial específica ($\text{H}_2\text{O}=180$ ppm, $\text{CO}_2=300$ ppm, $\text{S}=62$ ppm, $\text{N}=0.41$ ppm) para mostrar el efecto de la masa planetaria sobre la evolución de la atmósfera.

Las Figuras 5.16 y 5.17 muestran que, en el régimen de planetas rocosos con atmósferas secundarias, el incremento de masa conduce a envolturas atmosféricas geoméricamente más delgadas y composicionalmente más pesadas. La tendencia de la Figura 5.17 es consistente con la física de gases ideales (Ortenzi et al., 2020):

$$H = \frac{RT}{\mu g} \quad (5.17)$$

donde H es la altura de escala atmosférica. R es la constante de los gases, T la

Tabla 5.3*Escalamiento del radio y melt flux con la masa planetaria*

| Masa (M_{\oplus}) | Radio (m) | M_{melt} ($\text{m}^3/\text{año}$) |
|-----------------------|--------------------|---|
| 1.0 | 6.37×10^6 | 3.30×10^9 |
| 1.5 | 7.09×10^6 | 4.38×10^9 |
| 2.0 | 7.60×10^6 | 5.36×10^9 |
| 2.5 | 8.01×10^6 | 6.27×10^9 |
| 3.0 | 8.35×10^6 | 7.12×10^9 |
| 3.5 | 8.65×10^6 | 7.93×10^9 |
| 4.0 | 8.91×10^6 | 8.71×10^9 |
| 4.5 | 9.15×10^6 | 9.46×10^9 |
| 5.0 | 9.37×10^6 | 1.02×10^{10} |
| 5.5 | 9.57×10^6 | 1.09×10^{10} |
| 6.0 | 9.76×10^6 | 1.16×10^{10} |
| 6.5 | 9.94×10^6 | 1.22×10^{10} |
| 7.0 | 1.01×10^7 | 1.29×10^{10} |
| 7.5 | 1.02×10^7 | 1.35×10^{10} |
| 8.0 | 1.04×10^7 | 1.41×10^{10} |
| 8.5 | 1.05×10^7 | 1.48×10^{10} |
| 9.0 | 1.06×10^7 | 1.54×10^{10} |
| 9.5 | 1.07×10^7 | 1.60×10^{10} |
| 10.0 | 1.08×10^7 | 1.65×10^{10} |

Nota. Valores de radio planetario y *melt flux* (M_{melt}) en función de la masa planetaria expresada en M_{\oplus} .

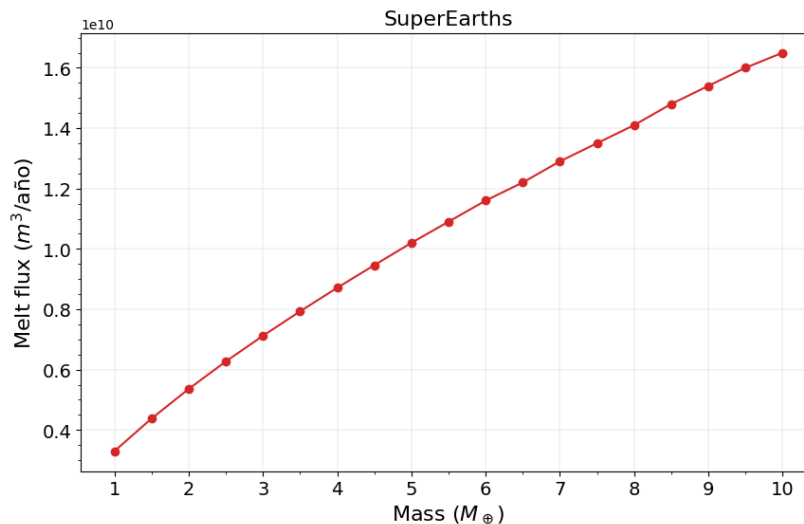
temperatura, μ el peso molecular medio y g la gravedad superficial.

La altura de escala disminuye con la gravedad superficial g . Adoptando una relación masa–radio típica de rocosos $R_p \propto M^{\beta}$ con $\beta \simeq 0.27$, se obtiene $g \propto M^{1-2\beta} \approx M^{0.46}$, de modo que, a temperatura T y peso molecular medio μ constantes, $H \propto M^{-0.46}$ (Valencia et al., 2006). La Figura 5.16 muestra, además, un corrimiento hacia especies más pesadas (p. ej., CO_2 , CO , CH_4 , N_2) a expensas de H_2 , lo que incrementa μ y refuerza la disminución de H (por la dependencia $H \propto 1/\mu$).

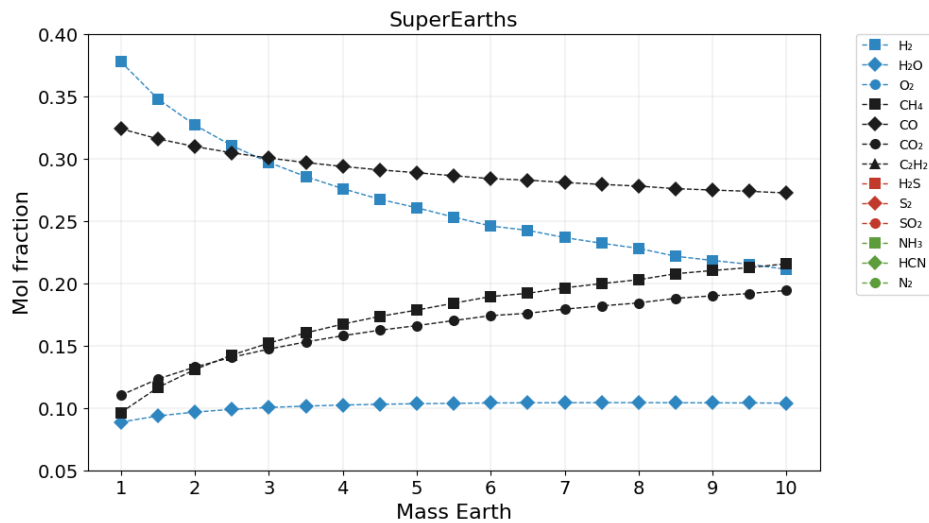
Los procesos internos y superficiales sostienen esta coevolución. A mayores masas planetarias, las presiones litostáticas elevadas reducen la productividad de fusión por descompresión y la flotabilidad de los magmas, lo que limita el vulcanismo y el suministro

Figura 5.15.

Cantidad de material fundido en función de la masa planetaria.

**Figura 5.16.**

Cambio composicional según la masa terrestre (las moléculas que no se observan están con valores muy cercanos a cero).

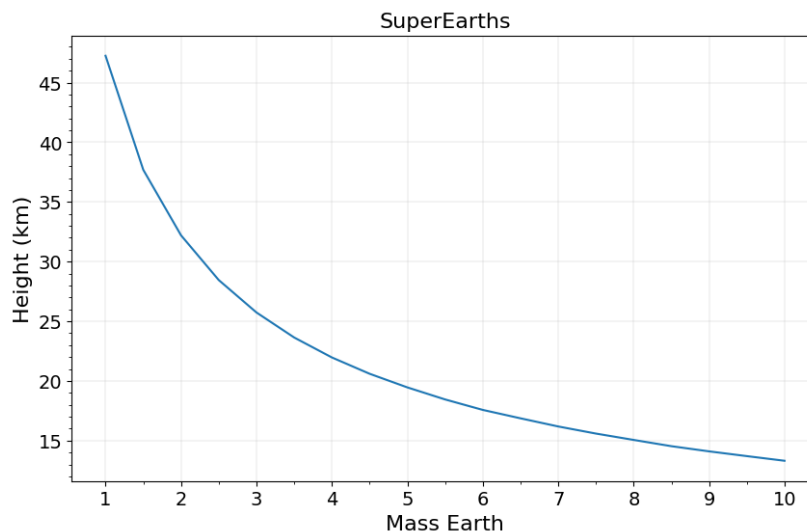


de volátiles a la superficie (Stamenković et al., 2012; Noack et al., 2017; Dorn et al., 2018).

En conjunto, el aumento de g (que comprime la atmósfera y reduce H) y la menor

Figura 5.17.

Cambio de la altura atmosférica según la masa terrestre



eficiencia de aporte de volátiles (que limita la columna de gas y desplaza la composición hacia especies de mayor masa) explican la disminución sistemática de la extensión atmosférica efectiva con la masa en supertierras, en concordancia con las tendencias observadas en las Figuras 5.16 y 5.17. Este marco se aplica a atmósferas secundarias; los cuerpos con envolturas primordiales ricas en H/He pueden exhibir un comportamiento distinto debido a la gran masa de gas retenida.

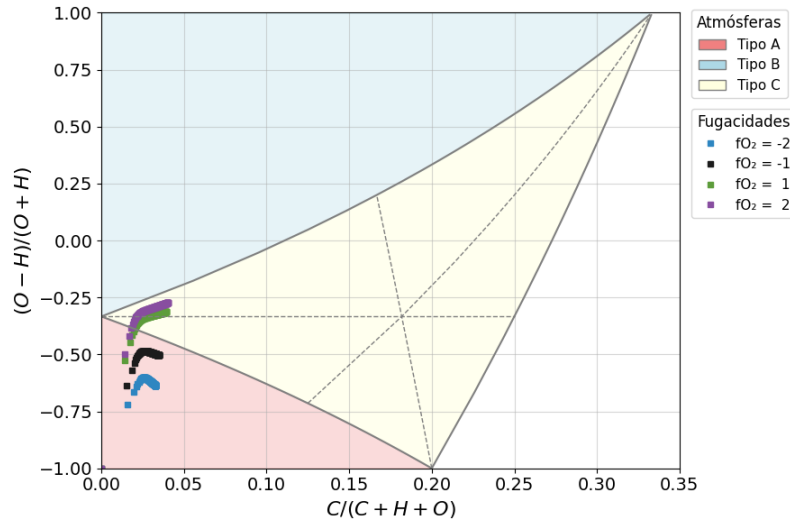
5.7. Atmósferas para planetas con mayor masa

Se replicaron las simulaciones descritas anteriormente para un planeta de $10M_{\oplus}$, con el fin de contrastar su evolución atmosférica con el caso de $1M_{\oplus}$ bajo las mismas composiciones mantélicas y niveles de fugacidad de oxígeno. De este modo, las diferencias entre ambos casos reflejan principalmente el efecto de la mayor masa (y gravedad superficial) sobre la distribución de H, C y O.

En primer lugar, se consideró la composición mantélica estándar (Figura 5.18). En este caso, la primera diferencia respecto de $1M_{\oplus}$ es que el modelo con $fO_2 = 0$ ($\Delta IW = 0$) no alcanzó convergencia numérica y, por tanto, no se reporta. En la evolución atmosférica se observan variaciones sistemáticas para cada valor de fugacidad: la curva correspondiente a $\Delta IW = +1$ se sitúa por encima de la línea punteada $CO_2 = CH_4$

Figura 5.18.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y composición mantélica estándar.



en $10M_{\oplus}$, mientras que para $\Delta IW = -2$ y -1 se aprecia una tendencia descendente, consistente con una menor acumulación de oxígeno. Además, los casos más oxidantes ($\Delta IW = +1$ y $+2$) alcanzan una estabilidad que no se obtuvo para $1M_{\oplus}$.

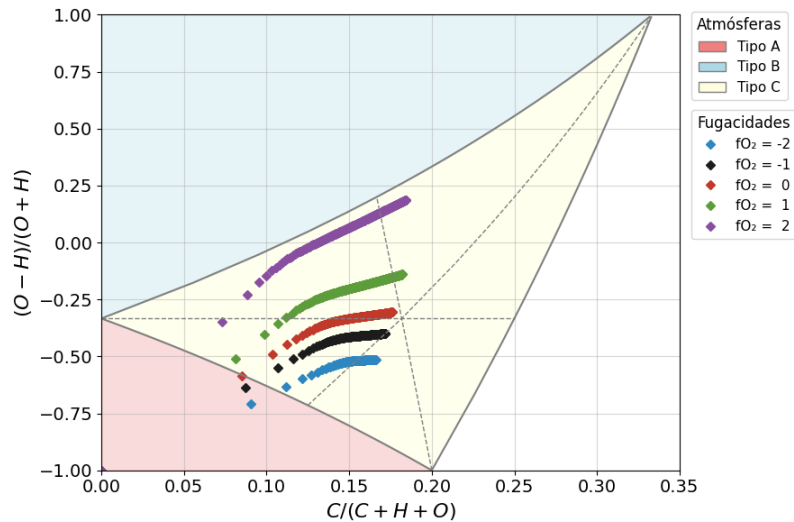
En el caso con relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto (Figura 5.19) se obtienen los mismos niveles de f_{O_2} que en $1M_{\oplus}$. La principal diferencia es un desplazamiento hacia composiciones más ricas en carbono: en $10M_{\oplus}$, las trayectorias asociadas a $\Delta IW = +1$ y $+2$ se ubican por encima de la línea punteada $CO_2 = H_2O$. Además, el caso $\Delta IW = 0$ excede con mayor margen la línea punteada $CO_2 = CH_4$, en concordancia con una mayor abundancia efectiva de oxígeno; por su parte, los casos $\Delta IW = -2$ y -1 sobrepasan la línea punteada $H_2O = CH_4$, consistente con un aumento relativo del carbono.

Cuando el manto es relativamente más pobre en agua (relación H_2O/CO_2 igual a 0.5), la principal diferencia respecto de $1M_{\oplus}$ es que los casos intermedios ($\Delta IW = +1, 0$ y -1) salen del dominio de atmósferas tipo C (Figura 5.20), lo que indica un enriquecimiento carbónico significativo. Además, el caso $\Delta IW = -2$ alcanza la línea punteada $CO_2 = CH_4$, umbral que no se había logrado en el planeta de $1M_{\oplus}$.

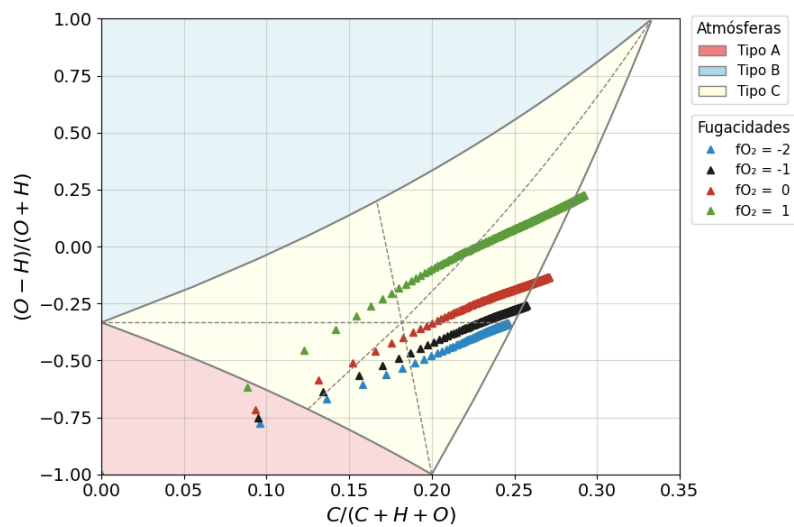
Por último, para una relación H_2O/CO_2 igual a 2 se obtienen nuevamente los mismos niveles de f_{O_2} que en $1M_{\oplus}$, pero se evidencia un mayor enriquecimiento en carbono: las trayectorias se extienden más a lo largo del eje x (Figura 5.21). Persiste la tendencia observada en $1M_{\oplus}$, sólo que las fugacidades más oxidantes ($\Delta IW > +3$)

Figura 5.19.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto.

**Figura 5.20.**

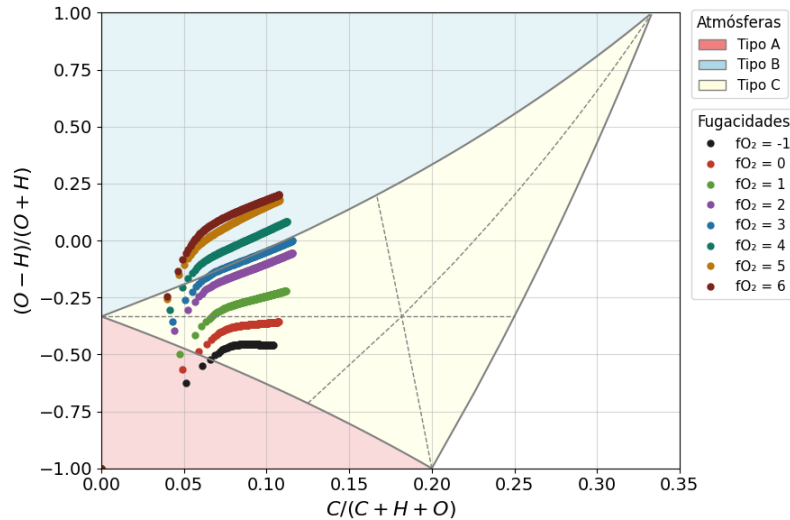
Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto.



alcanzan el dominio de atmósferas tipo B. En conjunto, la evolución es análoga a la

Figura 5.21.

Evolución de las diferentes fugacidades en el diagrama triangular para un planeta con 10 masas terrestres y relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto.



del planeta de $1M_{\oplus}$, pero sistemáticamente desplazada hacia composiciones más ricas en carbono.

En todas las simulaciones se observa que al aumentar la masa planetaria de 1 a $10M_{\oplus}$ se favorece un enriquecimiento en carbono. Esto indica que la masa planetaria actúa en conjunto con las abundancias de volátiles del manto para controlar la distribución de H, C y O en las atmósferas secundarias.

5.8. Comparación de la composición química atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres

En esta subsección se comparan las composiciones atmosféricas obtenidas para los planetas de $1M_{\oplus}$ y $10M_{\oplus}$. En todas las Figuras 5.22–5.25 se representa en el eje vertical el cociente

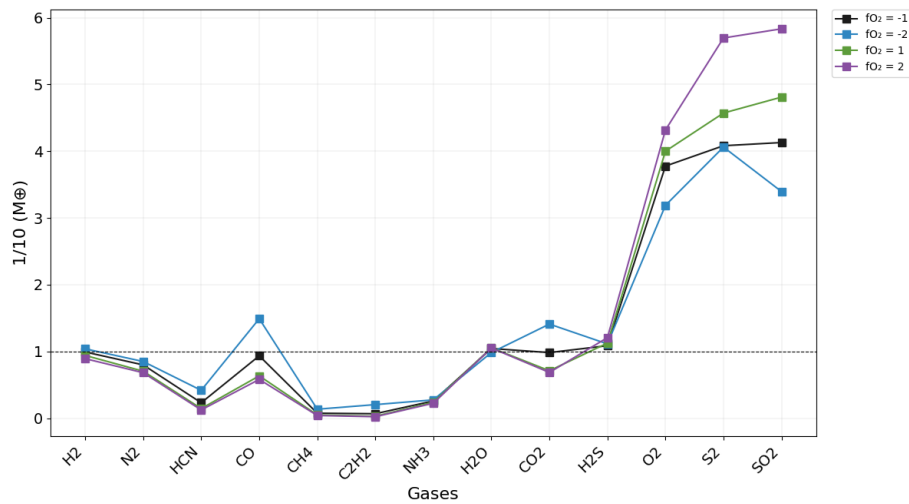
$$\frac{x_i(1M_{\oplus})}{x_i(10M_{\oplus})},$$

donde x_i es la fracción molar de la especie i ; de modo que la línea discontinua $y = 1$ marca la paridad entre ambas masas: valores > 1 indican enriquecimiento relativo en la atmósfera de $1M_{\oplus}$, mientras que valores < 1 señalan enriquecimiento en $10M_{\oplus}$.

Para la composición mantélica estándar (Figura 5.22), en los cuatro niveles de fO_2 considerados (-2,-1,+1,+2), H_2 y H_2O permanecen próximas a la paridad, con un sesgo leve de H_2S hacia $1M_{\oplus}$. Las especies reducidas ricas en C y N (CH_4 , C_2H_2 , NH_3 , HCN) se sitúan sistemáticamente por debajo de 1, lo que indica una mayor abundancia en $10M_{\oplus}$; N_2 también muestra un enriquecimiento moderado en $10M_{\oplus}$. El carbono oxidado responde al estado redox: CO y CO_2 están enriquecidos en $1M_{\oplus}$ bajo condiciones reductoras (-2), se aproximan a la paridad en -1 y pasan a dominar en $10M_{\oplus}$ a medida que el sistema se vuelve más oxidante (+1,+2). El mayor contraste se observa en O_2 , S_2 y SO_2 , con cocientes de $\sim 3-6$, lo que señala un enriquecimiento claro en $1M_{\oplus}$.

Figura 5.22.

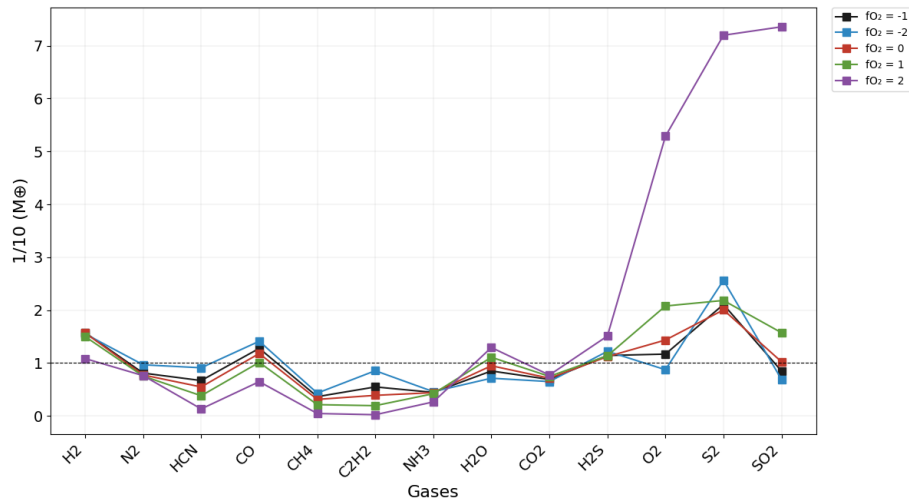
Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres y composición mantélica estándar.



Para una relación $H_2O/CO_2 = 1$ en el manto (Figura 5.23), H_2 aparece por encima de la paridad, mientras que N_2 se mantiene cercana a 1 en los cinco niveles de fO_2 (-2, -1, 0, +1, +2). Las especies reducidas ricas en C y N (CH_4 , C_2H_2 , NH_3 y HCN) permanecen por debajo de 1 en todo el barrido redox, lo que indica mayor abundancia en $10M_{\oplus}$. El carbono oxidado muestra un comportamiento diferenciado: CO pasa de > 1 en condiciones reductoras (-2) a < 1 en escenarios más oxidantes (+1,+2), mientras que CO_2 se mantiene ligeramente más abundante en $10M_{\oplus}$ para casi todos los casos. El agua varía con el estado redox: H_2O está por debajo de 1 en -2 y supera la paridad en (+1,+2). Entre las especies con mayor contraste figuran O_2 (hasta ~ 5 en +2) y el azufre elemental S_2 (hasta ~ 7 en +2), claramente enriquecidas en $1M_{\oplus}$ bajo condiciones oxidantes; H_2S oscila en torno a la paridad con un leve sesgo hacia $1M_{\oplus}$ cuando fO_2 es alto, y SO_2 muestra variaciones moderadas.

Figura 5.23.

Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 1 en el manto.

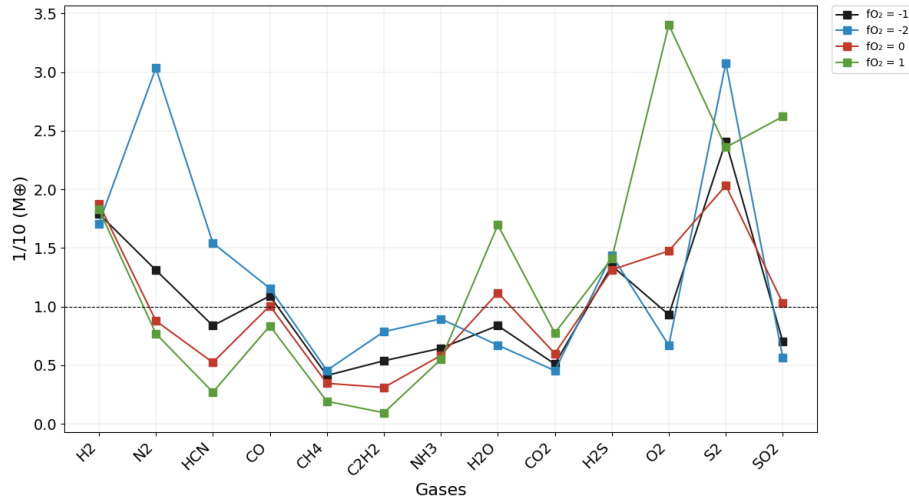


Para una relación $H_2O/CO_2 = 0.5$ en el manto (Figura 5.24), H_2 se mantiene por encima de la paridad en los cuatro niveles de fO_2 mostrados ($-2, -1, 0, +1$), mientras que N_2 sólo presenta un exceso marcado en condiciones muy reductoras (-2). Las especies fuertemente reducidas ricas en C y N permanecen por debajo de 1 a lo largo del barrido redox (más abundantes en $10M_{\oplus}$). Entre los óxidos de carbono, CO es ligeramente más abundante en $1M_{\oplus}$ en ($-2, -1$) y se acerca o cae por debajo de la paridad al hacerse el sistema más oxidante, mientras que CO_2 es más abundante en $10M_{\oplus}$ en casi todos los casos, indicando una mayor concentración en $10M_{\oplus}$. El agua depende del estado redox: es más abundante en $10M_{\oplus}$ en ($-2, -1$) y supera la paridad en 0 y, especialmente, en $+1$. En el azufre, H_2S oscila alrededor de la paridad con un sesgo leve hacia $1M_{\oplus}$; S_2 está consistentemente enriquecida en $1M_{\oplus}$ (picos $\gtrsim(2,3)$), y SO_2 pasa de ser más abundante en $10M_{\oplus}$ en -2 a ser más abundante en $1M_{\oplus}$ en $+1$.

Para un escenario con alto contenido de azufre y relación $H_2O/CO_2 = 2$ en el manto (Figura 5.25), el cociente de abundancias se evalúa a lo largo de un amplio barrido de fO_2 entre -1 y $+6$. H_2 y N_2 se sitúan por debajo de la paridad, mientras que HCN, C_2H_2 y NH_3 permanecen más abundantes en $10M_{\oplus}$ en todo el barrido redox, lo que confirma un sesgo general hacia especies reducidas de C–N en $10M_{\oplus}$. El carbono oxidado muestra un comportamiento mixto: CO es más abundante en $10M_{\oplus}$, en tanto que CO_2 se encuentra cerca de la paridad en $fO_2 \leq 0$ y desciende por debajo de 1 a medida que el sistema se vuelve más oxidante. El metano presenta una respuesta fuertemente redox-dependiente: está enriquecido en $1M_{\oplus}$ para $fO_2 \lesssim 1$ (cocientes > 1), pero colapsa a valores $\ll 1$ para

Figura 5.24.

Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 0.5 en el manto.



$fO_2 \geq 2$, indicando que pasa a concentrarse en $10M_{\oplus}$ en condiciones más oxidantes. El agua se mantiene ligeramente sobre-saturada (enriquecida en $1M_{\oplus}$) con una tendencia suave a decrecer con la oxidación, y el oxígeno molecular es despreciable en ambos casos (cociente ≈ 0). En el azufre se observan los contrastes más marcados: H_2S aumenta con la oxidación y alcanza máximos en $fO_2 = 6$ (claro enriquecimiento en $1M_{\oplus}$), S_2 es más abundante en $10M_{\oplus}$ en la mayor parte del rango, pero presenta un pico más abundante en $1M_{\oplus}$, también en $fO_2 = 6$, y SO_2 exhibe una respuesta no monótona, con un máximo alrededor de $fO_2 = 3$.

5.9. Comparación final de todas las simulaciones

La Figura 5.26 sintetiza el estado final alcanzado por todas las simulaciones realizadas en este trabajo, proyectadas en el diagrama triangular H–C–O de clasificación atmosférica propuesto por (Woitke et al., 2021). Cada punto representa la composición elemental final de una atmósfera después de 1 Gyr de evolución, y su color indica el estado redox mantélico inicial (ΔIW) del cual se originó. Las trayectorias evolutivas se muestran como líneas que conectan las composiciones iniciales, dominadas por hidrógeno puro, con las composiciones finales determinadas por las abundancias elementales acumuladas mediante desgasificación a lo largo del tiempo.

Figura 5.25.

Comparación de la evolución atmosférica entre 1 y 10 masas terrestres para una relación H_2O/CO_2 igual a 2 en el manto.

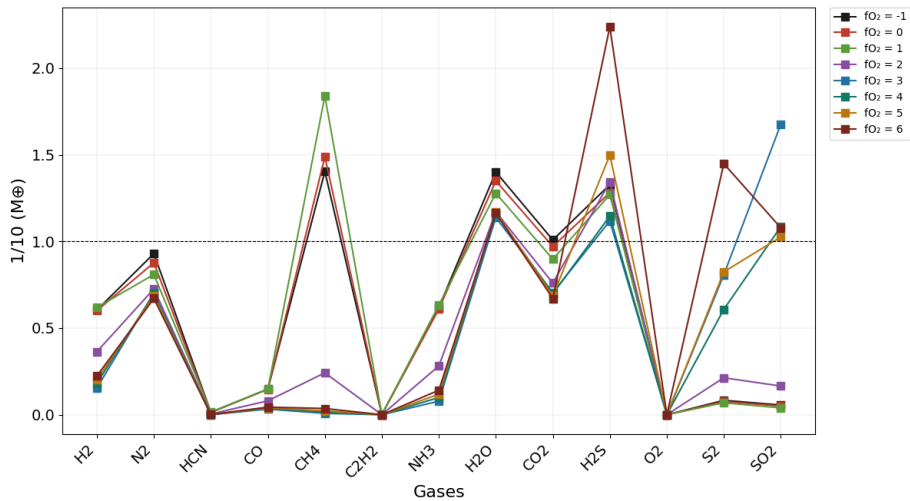
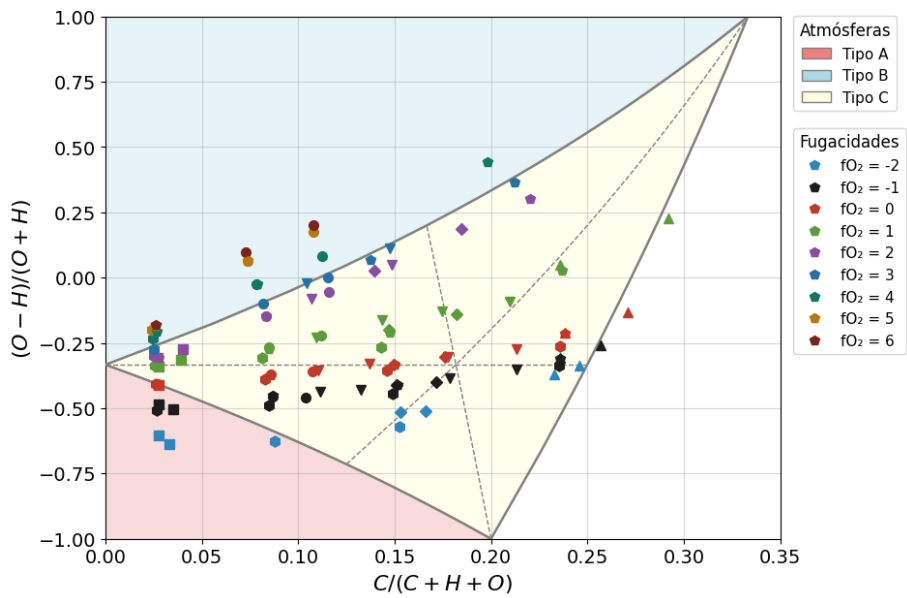


Figura 5.26.

Gráfica final de la evolución y clasificación atmosférica de todas las simulaciones.



En el diagrama se distinguen las regiones correspondientes a los tipos atmosféricos definidos por (Woitke et al., 2021). La línea que marca la separación entre atmósferas tipo

C y tipo B viene dada por la condición

$$O = 0.5H + 2C,$$

de modo que las composiciones finales que quedan a cada lado de esta frontera se asignan al tipo C o al tipo B, respectivamente. Considerando únicamente atmósferas generadas por procesos geológicos, la Figura 5.26 muestra que las simulaciones que producen atmósferas clasificadas como tipo B corresponden a estados redox mantélicos iniciales superiores a $\Delta IW \approx +3$, mientras que para valores menores de ΔIW las composiciones finales se concentran mayoritariamente en el dominio tipo C.

5.10. Detectabilidad de gases volcánicos con JWST

La caracterización observacional de atmósferas secundarias volcánicas mediante espectroscopía de transmisión con el Telescopio Espacial James Webb requiere identificar ventanas espectrales donde las especies predichas por las simulaciones presenten señales suficientemente intensas y distinguibles del ruido instrumental. Esta sección evalúa la capacidad del JWST para detectar las composiciones atmosféricas derivadas de las simulaciones con EVolve, conectando las predicciones teóricas con las capacidades técnicas del instrumento.

5.10.1. Ventanas espectrales y configuraciones instrumentales óptimas

Las especies moleculares identificadas en las simulaciones (SO_2 , H_2S , CO_2 , H_2O , CO y CH_4) poseen firmas espectrales características en el rango infrarrojo accesible al JWST (Tabla 5.4). El dióxido de azufre (SO_2), cuya abundancia atmosférica exhibe una fuerte dependencia del estado redox mantélico (sección 5.8), presenta dos ventanas prioritarias: una banda de absorción en $4.05\mu\text{m}$ accesible con NIRSpec en modo PRISM o G395H, y una región de absorción intensa en $7\text{--}9\mu\text{m}$ observable con MIRI LRS o MRS (Greene et al., 2016). La ventana $7\text{--}9\mu\text{m}$ ha sido validada observacionalmente mediante la detección de SO_2 en el gigante caliente WASP-39b con JWST/MIRI (Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023a), confirmando tanto la capacidad técnica del instrumento como la robustez de las bandas de absorción del SO_2 frente a contaminación por aerosoles. Para planetas rocosos, donde las alturas de escala atmosféricas son significativamente menores ($\sim 20\text{ km}$ vs. $\sim 1000\text{ km}$ en gigantes gaseosos), esta ventana permanece favorable debido a la intensidad intrínseca de las características espectrales.

El dióxido de carbono (CO_2), presente como componente mayoritario en la mayor

Tabla 5.4

Ventanas espectrales de gases volcánicos y configuraciones instrumentales óptimas del JWST. Selección basada en intensidad de bandas, superposición espectral mínima y validación observacional (Greene et al., 2016; Batalha et al., 2017; Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023a).

| Gas | Longitud de onda (μm) | Instrumento/Módulo JWST |
|------------------|--|--|
| SO ₂ | 4.05; 7–9 | NIRSpec (PRISM/G395H); MIRI LRS/MRS |
| H ₂ S | 3.9; 7.9 | NIRSpec (G395H); MIRI LRS/MRS |
| CO ₂ | 4.3 ; 15 | NIRSpec (G395H) ; MIRI MRS |
| H ₂ O | 1.4–2.8; 3; >5 | NIRISS SOSS; NIRSpec; MIRI |
| CO | 4.6 | NIRSpec (G395H) |
| CH ₄ | 3.3 | NIRSpec (G395H) |

Nota. Ventanas en negrita corresponden a configuraciones prioritarias para caracterización de atmósferas volcánicas rocosas. La banda 7–9 μm de SO₂ ha sido validada con detecciones en WASP-39b (Rustamkulov et al., 2023). Configuraciones basadas en herramientas de planificación *PandExo* (Batalha et al., 2017) y especificaciones técnicas de JWST (Greene et al., 2016).

parte del espacio de parámetros explorado, exhibe su banda de absorción más intensa centrada en 4.3 μm , accesible con NIRSpec G395H, y contribuciones adicionales en 15 μm observables con MIRI MRS (Greene et al., 2016). La banda en 4.3 μm ofrece una ventaja particular para los planetas rocosos calientes (600–1000 K) debido a su alta intensidad y superposición mínima con otras especies en este rango térmico (Rothman et al., 2013). El metano (CH₄), cuya presencia constituye un trazador diagnóstico de condiciones redox reductoras ($\Delta\text{IW} \lesssim 0$; sección 6.1), presenta una banda de absorción intensa en 3.3 μm observable con NIRSpec (Greene et al., 2016). La detección o no-detección de CH₄ en combinación con CO₂ permite discriminar entre mantos reductores e intermedios-oxidantes, proporcionando una restricción directa sobre el estado redox del interior planetario.

El vapor de agua (H₂O), componente ubicuo en todas las simulaciones independientemente del estado redox, muestra rasgos característicos en múltiples ventanas: 1.4–2.8 μm (NIRISS SOSS), $\sim 3 \mu\text{m}$ (NIRSpec) y $>5 \mu\text{m}$ (MIRI), motivando estrategias observacionales multi-modo que cubran un amplio rango espectral (Greene et al., 2016). El sulfuro de hidrógeno (H₂S), dominante bajo condiciones reductoras ($\Delta\text{IW} < 0$), exhibe características espectrales en 3.9 μm y 7.9 μm , observables con NIRSpec y MIRI respectivamente, permitiendo distinguir entre la especiación sulfurada reducida (H₂S), versus la oxidada (SO₂) mediante la razón de intensidades en estas bandas.

5.10.2. Caso de estudio: atmósfera con alto estado redox mantélico

Para evaluar cuantitativamente la detectabilidad de firmas volcánicas, se seleccionó como caso de estudio representativo una simulación con condiciones favorables para la observación: un planeta de masa y radio terrestres, composición mantélica con 400 ppm H₂O, 200 ppm CO₂ y 214 ppm S, temperatura superficial de 1000 K y estado redox fuertemente oxidante ($\Delta IW = +6$). Esta configuración corresponde al límite superior del espacio de parámetros explorado en estado redox y genera una atmósfera secundaria con presión superficial moderada ($\sim 1\text{--}5$ bar) tras 1 Gyr de evolución volcánica.

La composición atmosférica final predicha por E_Volve para este escenario exhibe fracciones molares dominadas por H₂O (57.5%), SO₂ (21.6%) y CO₂ (20.1%), con especies subordinadas H₂S ($\sim 0.6\%$) y S₂ ($\sim 0.045\%$). La masa molecular media resultante es $\mu = 33.3 \text{ g mol}^{-1}$, y la altura de escala atmosférica, calculada mediante $H = RT/\mu g$, alcanza 20.4 km a 1000 K. Este perfil composicional, particularmente el alto contenido de SO₂, representa un escenario favorable para la detección, análogo a atmósferas volcánicamente activas como la venusiana, pero con una geometría de transmisión accesible debido a la configuración orbital cercana requerida para mantener temperaturas superficiales elevadas alrededor de enanas M.

Para maximizar el realismo observacional, se adoptaron parámetros del sistema TRAPPIST-1 como referencia: estrella enana M8V con $T_{\text{eff}} = 2510 \text{ K}$, $R_{\star} = 0.119 R_{\odot}$ y magnitud $J = 11.35$ (Gillon et al., 2017; Grimm et al., 2018). El planeta se situó en una configuración análoga a TRAPPIST-1e, con un período orbital $P = 6.10 \text{ d}$, una duración de tránsito $T_{14} = 0.93 \text{ h}$ y una temperatura de equilibrio consistente con los $\sim 800 \text{ K}$ en el terminador adoptados para el cálculo de la escala de altura. La geometría de transmisión favorable, razón $R_p/R_{\star} \approx 0.08$, y la frecuencia de tránsitos (~ 60 eventos por año terrestre) hacen de este sistema un análogo representativo para evaluar la detectabilidad.

5.10.3. Estimación de señales de transmisión

La amplitud de una banda de absorción molecular en espectros de transmisión se estima mediante:

$$\Delta D \approx \frac{2NH R_p}{R_{\star}^2} \quad (5.18)$$

donde N representa el número efectivo de alturas de escala que contribuyen a la señal, típicamente en el rango de 3 a 7 para bandas intensas en atmósferas libres de nubes opacas (Kreidberg et al., 2014). Sustituyendo $H = 20.4 \text{ km}$, $R_p = 6.371 \times 10^6 \text{ m}$ y $R_{\star} = 8.28 \times 10^7 \text{ m}$ (correspondiente a $0.119 R_{\odot}$), la ecuación (5.18) produce amplitudes en el rango:

$$\Delta D = 113\text{--}265 \text{ ppm} \quad \text{para } N = 3\text{--}7 \quad (5.19)$$

con un valor central de 189 ppm para $N = 5$, adoptado como estimación representativa. Estas amplitudes son comparables a las observadas en planetas sub-Neptunianos con el JWST y significativamente superiores al límite de ruido fotométrico del instrumento ($\sim 20\text{--}50$ ppm por canal en series temporales largas), sugiriendo detectabilidad técnica en principio.

5.10.4. *Análisis cuantitativo de detectabilidad: SO₂ y CO₂*

La relación señal-ruido integrada en una banda de absorción molecular se estima como:

$$S/N_{\text{band}} = \frac{\Delta D}{\sigma_{\text{bin}}} \sqrt{N_{\text{bins}}} \quad (5.20)$$

donde σ_{bin} es el ruido por canal espectral y N_{bins} el número de canales independientes dentro de la banda molecular. Para observaciones de series temporales con JWST, se adoptan niveles conservadores de ruido instrumental: $\sigma_{\text{bin}} = 100$ ppm para NIRSpec en modo PRISM/G395H binned a resolución $R \sim 100$, y $\sigma_{\text{bin}} = 100$ ppm para MIRI-LRS a resolución $R \sim 50$ (Greene et al., 2016; Batalha et al., 2017; Beichman et al., 2014). Estos valores son conservadores comparados con el desempeño demostrado en observaciones de comisionamiento ($\sim 50\text{--}80$ ppm alcanzados en algunos programas), proporcionando estimaciones robustas.

- **Dióxido de azufre (SO₂) en 7–9 μm (MIRI-LRS).** La banda de absorción del SO₂ en esta ventana se extiende sobre un rango espectral que, a resolución $R \sim 50$, se resuelve en aproximadamente 4–6 canales independientes. Sustituyendo en la ecuación (5.20):

$$S/N_{\text{band}}(\text{SO}_2) = \frac{189 \text{ ppm}}{100 \text{ ppm}} \sqrt{4\text{--}6} = 3.8\text{--}4.6 \quad (\text{por tránsito}) \quad (5.21)$$

Para alcanzar detección robusta a nivel 5σ , se requieren:

$$N_{\text{transits}} = \left(\frac{5}{S/N_{\text{band}}} \right)^2 \approx 1.2\text{--}1.7 \quad \Rightarrow \quad \boxed{N_{\text{transits}} \approx 2} \quad (5.22)$$

Este resultado indica que SO₂ en atmósferas con alto estado redox mantélico ($\Delta\text{IW} \sim +6$) es detectable con MIRI-LRS mediante observación de 2 tránsitos, equivalente a aproximadamente 12 días de tiempo de telescopio considerando duración de tránsito, overheads instrumentales y tiempo de establecimiento.

- **Dióxido de carbono (CO₂) en 4.3 μm (NIRSpec G395H).** La banda de absorción fundamental del CO₂ se resuelve en aproximadamente 3–5 canales independientes

a resolución $R \sim 100$ en la configuración G395H. La relación señal-ruido integrada resulta:

$$S/N_{\text{band}}(\text{CO}_2) = \frac{189 \text{ ppm}}{100 \text{ ppm}} \sqrt{3-5} = 3.3-4.2 \quad (\text{por tránsito}) \quad (5.23)$$

lo que corresponde a:

$$N_{\text{transits}} = \left(\frac{5}{S/N_{\text{band}}} \right)^2 \approx 1.4-2.3 \quad \Rightarrow \quad \boxed{N_{\text{transits}} \approx 2-3} \quad (5.24)$$

CO_2 requiere entre 2 y 3 tránsitos para detección a 5σ con NIRSpec, siendo ligeramente menos favorable que SO_2 debido al menor número de canales independientes en la banda y a la superposición parcial con rasgos de H_2O en esta región espectral.

5.10.5. Dependencia de la detectabilidad con el estado redox mantélico

Los resultados de detectabilidad presentados corresponden al escenario de máxima oxidación ($\Delta\text{IW} = +6$) explorado en las simulaciones, que genera las mayores abundancias de SO_2 (21.6 % molar). La dependencia de la detectabilidad con el estado redox se evalúa extrapolando las abundancias predichas por EVolve para diferentes valores de ΔIW bajo composición mantélica fija (Fig. 5.11). Para $\Delta\text{IW} = +3$, umbral identificado para la transición hacia atmósferas tipo B, la fracción molar de SO_2 disminuye a $\sim 5\%$, reduciendo la amplitud de señal a $\Delta D \sim 50-120$ ppm y aumentando el número de tránsitos requerido a 4-6 para detección robusta. En condiciones de oxidación intermedia ($\Delta\text{IW} \sim +1$ a $+2$), SO_2 cae a niveles de $\sim 1\%$, situándose en el límite de detectabilidad incluso con campañas observacionales extensas (>10 tránsitos).

Para CO_2 , la detectabilidad es menos sensible al estado redox debido a su presencia mayoritaria en la mayor parte del espacio de parámetros ($\Delta\text{IW} \gtrsim -1$), manteniéndose detectable con 2-4 tránsitos para $\Delta\text{IW} > 0$. CH_4 , por el contrario, solo es detectable bajo condiciones reductoras ($\Delta\text{IW} \lesssim 0$), donde alcanza fracciones molares de $\sim 1-10\%$, generando señales de $\Delta D \sim 20-100$ ppm en su banda de $3.3 \mu\text{m}$. La detección o no-detección de CH_4 en combinación con CO_2 proporciona así una restricción binaria sobre el estado redox: presencia de CH_4 implica $\Delta\text{IW} < 0$ (manto reductor), mientras que ausencia con CO_2 detectable implica $\Delta\text{IW} \gtrsim +1$ (manto oxidante).

5.10.6. *Análisis de detectabilidad y conexión con simulaciones*

El análisis de detectabilidad demuestra que gases volcánicos clave (SO_2 y CO_2) predichos por las simulaciones con EVolve son técnicamente accesibles con JWST en configuraciones favorables (Tabla 5.5). Para atmósferas con alto estado redox mantélico ($\Delta IW \sim +6$), representativas del extremo oxidante del espacio de parámetros explorado, se requieren 2 tránsitos para SO_2 (MIRI, $7\text{--}9 \mu\text{m}$) y 2–3 tránsitos para CO_2 (NIRSpec, $4.3 \mu\text{m}$) para alcanzar detecciones a 5σ . Estas estimaciones son realistas para planetas rocosos alrededor de enanas M compactas tipo TRAPPIST-1 y representan inversiones de tiempo de telescopio modestas (10–20 h por especie).

Tabla 5.5

Detectabilidad estimada de gases volcánicos con JWST para atmósfera secundaria con $\Delta IW = +6$ alrededor de estrella tipo TRAPPIST-1.

| Molécula | Ventana | Modo JWST | Amplitud | N_{bins} | Tránsitos 5σ |
|-----------------|---------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|-------------------|---------------------|
| SO_2 | $7\text{--}9 \mu\text{m}$ | MIRI LRS | $\sim 189 \text{ ppm}$ | 4–6 | 2 |
| CO_2 | $4.3 \mu\text{m}$ | NIRSpec G395H ($R \sim 100$) | $\sim 189 \text{ ppm}$ | 3–5 | 2–3 |
| CH_4^* | $3.3 \mu\text{m}$ | NIRSpec G395H | $\sim 50\text{--}100 \text{ ppm}$ | 2–3 | 5–10 |

Nota. * CH_4 solo detectable bajo condiciones reductoras ($\Delta IW \lesssim 0$); amplitud estimada asumiendo fracción molar $\sim 1\text{--}5 \%$. N_{bins} es el número efectivo de canales espectrales independientes; S/N integrada: $S/N_{\text{band}} = (\Delta D / \sigma_{\text{bin}}) \sqrt{N_{\text{bins}}}$ con $\sigma_{\text{bin}} = 100 \text{ ppm}$. Estimaciones asumen atmósfera libre de nubes opacas y estrella inactiva. Los cálculos asumen un planeta de radio terrestre orbitando una enana M8V con parámetros tipo TRAPPIST-1, altura de escala atmosférica $H \approx 20 \text{ km}$, y composiciones atmosféricas finales después de 1 Gyr de evolución volcánica según simulaciones con EVolve.

La dependencia de la detectabilidad con el estado redox, cuantificada mediante extrapolación de abundancias simuladas, indica que SO_2 constituye un trazador selectivo de condiciones oxidantes ($\Delta IW \gtrsim +3$), mientras que CH_4 señala mantos reductores ($\Delta IW \lesssim 0$). CO_2 y H_2O , presentes en la mayoría de escenarios, proporcionan detecciones robustas independientes del estado redox pero con menor poder diagnóstico. La caracterización multiespecie mediante observación simultánea de las ventanas $3.3 \mu\text{m}$ (CH_4), $4.3 \mu\text{m}$ (CO_2) y $7\text{--}9 \mu\text{m}$ (SO_2) permite, en principio, discriminar entre los tres regímenes redox identificados en las simulaciones (reductor, intermedio, oxidante).

Limitaciones observacionales pueden degradar detectabilidad, requiriendo campañas observacionales extendidas o estrategias multi-modo (transmisión + emisión). No obstante, para el subconjunto de sistemas con geometría favorable, estrellas inactivas y atmósferas relativamente claras, la caracterización de firmas volcánicas mediante espectroscopía con JWST es factible, habilitando por primera vez la conexión

observacional entre procesos de desgasificación mantélica simulados y atmósferas exoplanetarias reales.

6. Discusión

6.1. EVOlve como herramienta integradora de procesos planetarios

El código EVOlve (Liggins et al., 2022) constituye una plataforma de modelación que integra procesos geoquímicos del interior planetario con la evolución atmosférica resultante. A diferencia de enfoques que tratan la desgasificación como un flujo prescrito de composición fija, EVOlve acopla explícitamente: (i) la fusión parcial del manto controlada por la temperatura y el estado redox, (ii) la exsolución de volátiles del magma ascendente mediante leyes de solubilidad, y (iii) la especiación atmosférica en equilibrio termoquímico. Este acoplamiento permite explorar, de forma autoconsistente, cómo las variaciones en parámetros planetarios fundamentales (masa, composición mantélica inicial y fugacidad de oxígeno) se transmiten desde el interior del planeta, pasan por la desgasificación y culminan en la configuración de la atmósfera.

En este trabajo, EVOlve permitió identificar controles de primer orden sobre la evolución atmosférica. El barrido sistemático del espacio de parámetros (temperatura atmosférica 600–1000 K, relaciones $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ de 0.5 a 7, ΔIW de -2 a $+6$, y masas planetarias de 1 a $10 M_{\oplus}$) reveló que, bajo el supuesto de equilibrio químico, las abundancias elementales H, C y O se conservan independientemente de la temperatura, mientras que las fracciones moleculares no. Esta propiedad, implica que la posición de un sistema en el diagrama triangular H-C-O depende exclusivamente de las abundancias elementales totales y no de la temperatura (Stock et al., 2018; Voitke et al., 2021). Por el contrario, la especiación molecular es fuertemente dependiente de T y $f\text{O}_2$, lo que subraya la necesidad de caracterizar ambos parámetros para interpretar observaciones espectrales (Gaillard and Scaillet, 2014; Wordsworth and Kreidberg, 2022).

Sin embargo, es fundamental reconocer las limitaciones estructurales del modelo. EVOlve asume que la atmósfera se encuentra en equilibrio químico instantáneo, una aproximación razonable cuando las escalas de tiempo de las reacciones son mucho más cortas que las asociadas al suministro de gases volcánicos y a la mezcla atmosférica (Zahnle et al., 2010). No obstante, en atmósferas donde la fotoquímica es intensa, por ejemplo, bajo fuerte irradiación UV de estrellas jóvenes o enanas M activas, especies como O_2 , O_3 , y radicales pueden acumularse fuera del equilibrio

termodinámico (Wordsworth et al., 2018; Meadows et al., 2018). Además, el modelo no incluye procesos de escape atmosférico (hidrodinámico, térmico o no térmico), que a lo largo de millones de años pueden fraccionar isótopos y favorecer la pérdida selectiva de especies ligeras, en particular H_2 y H_2O , modificando de manera sustancial las abundancias elementales (Catling and Kasting, 2017; Lammer et al., 2018). La ausencia de acoplamiento con un modelo geodinámico del interior implica que la tasa de producción de fundido (M_{melt}) se escala empíricamente con la masa planetaria (sección 5.6), pero no responde a cambios en la estructura térmica interna, composición del manto o modo tectónico a lo largo de la evolución. Trabajos futuros deberían integrar EVolve con códigos de convección mantélica (p. ej., ASPECT, StagYY) para permitir retroalimentación entre desgaseificación, enfriamiento del manto y evolución tectónica (Noack et al., 2017; Dorn et al., 2018).

6.2. El estado redox del manto como organizador composicional

Los resultados demuestran que la fugacidad de oxígeno del manto, expresada como ΔIW , actúa como un parámetro de control de primer orden sobre la composición atmosférica final. Este control se manifiesta en la especiación de los elementos redox-sensibles C, H y S. A medida que aumenta ΔIW , la química atmosférica se desplaza sistemáticamente desde un régimen dominado por especies reducidas (CH_4 , CO , H_2 , H_2S) hacia composiciones donde predominan formas más oxidadas (CO_2 , H_2O , SO_2), de modo que las especies reducidas se vuelven progresivamente menos abundantes (Hirschmann, 2012; Gaillard and Scaillet, 2014). En el sistema H-C-O, el cruce de dominios composicionales ocurre en umbrales específicos de ΔIW que dependen débilmente de T en el rango considerado (600–1000 K), lo que explica por qué las trayectorias evolutivas en el diagrama triangular son iguales, independientemente de la temperatura atmosférica (Figuras 5.4, 5.8, 5.10 y 5.12).

El efecto del estado redox es particularmente evidente en la transición entre atmósferas tipo C (dominadas por H_2O , CO_2 , CH_4 , N_2) y tipo B (dominadas por O_2 , H_2O , CO_2 , N_2) según la clasificación de (Woitke et al., 2021). En nuestras simulaciones, únicamente escenarios con $\Delta IW \gtrsim +3$ lograron alcanzar composiciones tipo B (Figura 5.26). Este umbral refleja un límite termodinámico: bajo equilibrio gas-roca, la capacidad oxidativa del sistema está limitada por la disponibilidad de Fe^{3+} en silicatos y por el balance estequiométrico entre H, C y O (Schaefer and Fegley, 2010; Sossi et al., 2020). Valores de $\Delta IW > +3$ son comparables a los inferidos para el manto terrestre moderno en zonas de arco ($\Delta IW \sim +1$ a $+2$; (Kelley and Cottrell, 2009)) y exceden significativamente las condiciones del manto primitivo terrestre ($\Delta IW \sim -2$; (Trail

et al., 2011)). La existencia de mantos tan oxidados en exoplanetas rocosos es plausible bajo ciertos escenarios de formación, incluyendo: (i) diferenciación núcleo-manto bajo condiciones de océano de magma profundo, donde la partición de O entre metal y silicato puede enriquecer el manto en FeO (Rubie et al., 2015); (ii) acreción tardía de material oxidado rico en agua (Wordsworth et al., 2018); y (iii) oxidación progresiva por escape de H_2 a lo largo de millones de años, proceso que ha sido propuesto para explicar el aumento de fO_2 en la Tierra arcaica (Kasting et al., 1993; Catling et al., 2001).

Sin embargo, es importante enfatizar que, incluso con ΔIW elevado, la acumulación de O_2 atmosférico mayoritario bajo procesos puramente geológicos enfrenta límites estequiométricos y cinéticos. La desgasificación volcánica libera predominantemente H_2O , CO_2 y SO_2 en ambientes oxidados, pero no O_2 molecular directamente (Gaillard and Scaillet, 2014). La producción de O_2 requiere fotólisis de H_2O acompañada de escape irreversible de H, un proceso que opera en escalas de tiempo de $\sim 10^8$ – 10^9 años y cuya eficiencia depende críticamente del flujo UV estelar y de la estructura atmosférica (Luger and Barnes, 2015). En ausencia de estos procesos no geológicos, el O_2 permanece en niveles traza ($\lesssim 10^{-4}$ bar) aun con mantos altamente oxidados, ya que es consumido por reacciones con H_2 , CO, CH_4 y por oxidación de rocas superficiales (Zahnle et al., 2010; Meadows et al., 2018). Por lo tanto, el umbral $\Delta IW \gtrsim +3$ identificado en este trabajo debe interpretarse como una condición necesaria pero no suficiente para atmósferas ricas en O_2 : preconditiona el sistema reduciendo el flujo reductor volcánico, pero no genera por sí solo niveles de O_2 comparables a los terrestres actuales. Esta distinción es crítica para la interpretación de potenciales biosignaturas: la codetección de $O_2 + CH_4$ en atmósferas de exoplanetas rocosos ha sido propuesta como indicador de actividad biológica (Meadows et al., 2018), pero nuestros resultados advierten que combinaciones específicas de alto ΔIW + fotólisis activa + inventarios de H/C/O particulares podrían producir O_2 abiótico, requiriendo contexto multiparamétrico para su interpretación (Schwieterman et al., 2018; Krissansen-Totton et al., 2018).

Estos resultados sugieren que la caracterización del estado redox del manto (aunque indirecta) es factible mediante la identificación de patrones diagnósticos de especiación atmosférica. Las simulaciones demuestran que el estado redox controla la partición de especies mayoritarias mediante equilibrios termodinámicos fundamentales: bajo condiciones reductoras ($\Delta IW < 0$), el sistema favorece especies reducidas como CH_4 y H_2 junto con H_2O , mientras que condiciones oxidantes ($\Delta IW > +1$) desplazan la especiación hacia CO_2 , H_2O y SO_2 , con CH_4 relegado a niveles traza (Gaillard and Scaillet, 2014). La transición composicional se manifiesta en cambios observables: la presencia simultánea de CH_4 y CO_2 en abundancias comparables señala condiciones redox intermedias ($\Delta IW \sim 0$ a $+1$), mientras que atmósferas dominadas exclusivamente por $CO_2 + H_2O$ con ausencia de CH_4 detectable indican $\Delta IW \gtrsim +2$ (Schaefer and Fegley, 2010). Para el azufre, el desplazamiento desde H_2S (dominante bajo $\Delta IW < 0$) hacia SO_2 (dominante bajo $\Delta IW > +1$) proporciona un trazador adicional, observable en las

ventanas $3.9 \mu\text{m}$ (H_2S) y $7\text{--}9 \mu\text{m}$ (SO_2) con JWST/NIRSpec y MIRI respectivamente (Tabla 5.4), ofreciendo la posibilidad de poner a prueba estas predicciones en sistemas reales (Greene et al., 2016; Lustig-Yaeger et al., 2023). La relación $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ del manto, variada sistemáticamente entre 0.5 y 7 en este trabajo, modula las abundancias absolutas pero no altera los umbrales redox que definen las transiciones entre tipos atmosféricos, confirmando que ΔIW actúa como control de primer orden en la evolución química de las atmósferas (Ortenzi et al., 2020). La caracterización espectroscópica de especies clave (CH_4 , CO_2 , H_2O , SO_2 , H_2S) en el rango $3\text{--}10 \mu\text{m}$ con JWST puede, en principio, restringir la ΔIW mantélica cuando se combina con restricciones térmicas (T_{eq}) y gravitacionales (masa, radio) del planeta mediante modelos de equilibrio químico (Gandhi and Madhusudhan, 2019; Mollière et al., 2019).

6.3. Efecto de la masa planetaria sobre la desgasificación y composición atmosférica

El escalamiento de la producción de fundido con la masa planetaria, derivado en la sección 5.6 a partir de leyes de convección térmica del manto, predice $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$ (ecuación 5.16). Este resultado es consistente con estimaciones geodinámicas previas que indican que, en el régimen de supertierras ($1\text{--}10 M_{\oplus}$), el flujo de calor total aumenta sublinealmente con la masa debido al incremento de la gravedad superficial y a la compresión del manto (Valencia et al., 2007; Kite et al., 2009). Bajo este escalamiento, un planeta de $10 M_{\oplus}$ produce aproximadamente 5 veces más material fundido que la Tierra (Tabla 5.3), lo que en principio debería traducirse en un mayor suministro volcánico de volátiles y, consecuentemente, en atmósferas más masivas y enriquecidas en especies de origen mantélico.

Sin embargo, las simulaciones revelan una tendencia opuesta en la composición final: planetas de $10 M_{\oplus}$ exhiben sistemáticamente menor abundancia de especies portadoras de azufre (SO_2 , H_2S , S_2) en comparación con planetas de $1 M_{\oplus}$ bajo condiciones iniciales equivalentes (Figuras 5.22–5.25). Esta aparente paradoja—mayor producción de fundido pero menor contenido atmosférico de volátiles volcánicos—requiere una interpretación cuidadosa que considere múltiples procesos compensatorios.

- **Mecanismo 1: Atenuación de la actividad tectónica en supertierras.** Diversos modelos geodinámicos sugieren que el incremento de masa planetaria favorece regímenes de tectónica estancada o episódica sobre tectónica de placas móvil continua (O'Neill and Lenardic, 2007; Noack et al., 2017). Este cambio de régimen se atribuye a: (i) el aumento del estrés de fluencia de la litosfera con la

gravedad superficial, lo que dificulta la iniciación y el mantenimiento de zonas de subducción (Kaltenegger et al., 2010); (ii) la mayor viscosidad efectiva del manto debido al incremento de presión, que reduce las velocidades convectivas y el número de Rayleigh efectivo (Stamenković et al., 2012); y (iii) el engrosamiento de la litosfera por enfriamiento conductivo más eficiente en planetas masivos, lo que aumenta su resistencia mecánica (Dorn et al., 2018). En regímenes de tectónica estancada, la ausencia de reciclaje litosférico limita la extrusión de magma hacia la superficie, concentrando el vulcanismo en eventos episódicos de gran magnitud (Morschhauser et al., 2011; Gillmann and Tackley, 2014). Aunque la cantidad total de fundido producido en el manto sea elevado ($M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$), su transferencia efectiva a la atmósfera puede estar severamente reducida, resultando en tasas eruptivas globales atenuadas y, consecuentemente, en un aporte volcánico neto de volátiles menor del esperado por el escalamiento térmico.

- **Mecanismo 2: Mayor secuestro de volátiles en el interior por efectos de presión.** A las presiones litostáticas elevadas que caracterizan los mantos de supertierras ($\gtrsim 25$ GPa a $10 M_{\oplus}$, comparado con ~ 13 GPa en la Tierra; (Valencia et al., 2006)), la solubilidad y especiación de volátiles en fases minerales profundas cambian significativamente. Para el azufre, estudios experimentales indican que a presiones >10 GPa la capacidad de sulfuro del manto (fracción de S que puede disolverse en silicatos como S^{2-}) disminuye, favoreciendo la partición de S hacia sulfuros metálicos (FeS, FeNi-sulfuros) que permanecen en el manto o migran hacia el núcleo (Boujibar et al., 2014; Namur et al., 2016). Además, en condiciones de alta presión y alta fO_2 , el azufre puede estabilizarse como sulfatos (S^{6+}) en fases minerales accesorias (anhidrita, barita), secuestrándolo del reservorio disponible para desgasificación (Métrich et al., 2004; Jégo and Pichavant, 2012). Este efecto se amplifica si el manto de supertierras experimenta transiciones de fase minerales adicionales que pueden incorporar volátiles en su estructura cristalina (Irifune and Tsuchiya, 2007). En conjunto, estos mecanismos reducen la fracción de S disponible para exsolución en magmas ascendentes, lo que se manifiesta como menor abundancia de especies sulfuradas en la atmósfera a pesar del mayor volumen total de fundido producido.
- **Mecanismo 3: Diferencias en la especiación redox del azufre con presión.** La especiación del azufre en magmas es fuertemente dependiente de fO_2 y P . A bajas presiones ($\lesssim 5$ GPa), el equilibrio dominante es $2FeO + S_2(\text{gas}) \rightleftharpoons 2FeS + O_2(\text{gas})$, donde incrementos en fO_2 desplazan el azufre hacia formas oxidadas gaseosas (SO_2 , SO_3) que desgasifican eficientemente (Métrich and Mandeville, 2010). Sin embargo, a presiones elevadas ($\gtrsim 10$ GPa), la estabilidad de sulfatos en el fundido aumenta, compitiendo con la liberación gaseosa de SO_2 (Beermann and Zakharova, 2017). Además, la solubilidad del SO_2 en fundidos silicatados aumenta con la presión, lo que reduce la fracción que exsolve durante el ascenso

magmático (Moussallam et al., 2016). En supertierras, donde los magmas se generan a profundidades mayores y ascienden a través de gradientes de presión más pronunciados, estos efectos pueden disminuir la eficiencia de desgasificación del azufre, resultando en un menor S atmosférico, aún con abundancias mantélicas comparables.

Proponemos que la tendencia observada, menor S atmosférico en planetas masivos, refleja la combinación sinérgica de los tres mecanismos anteriores. El escalamiento térmico $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$ describe la producción interna de fundido, pero no captura la eficiencia de transferencia de ese fundido (y sus volátiles) hacia la atmósfera. En supertierras, el cambio de régimen tectónico (mecanismo 1) actúa como una restricción principal que limita la conectividad manto-atmósfera, mientras que los efectos de alta presión (mecanismos 2 y 3) reducen el inventario de S disponible para exsolución y su fracción que desgasifica. Esta interpretación encuentra apoyo indirecto en estudios comparativos del sistema solar: Venus ($\sim 0.82 M_{\oplus}$) y la Tierra tienen actividad volcánica significativa y atmósferas enriquecidas en volátiles volcánicos (SO_2 en Venus; CO_2 , H_2O en ambos), mientras que Marte ($\sim 0.11 M_{\oplus}$) muestra evidencia de vulcanismo antiguo pero limitado aporte atmosférico contemporáneo debido a su menor tamaño y enfriamiento temprano (Greeley and Spudis, 1981; Grott et al., 2011). Aunque esta comparación se limita al rango sub-terrestre, sugiere que existe una ventana óptima de masa planetaria ($\sim 0.5\text{--}1.5 M_{\oplus}$) donde la combinación de producción de fundido suficiente y tectónica activa maximiza la desgasificación, mientras que masas mayores podrían experimentar atenuación por los mecanismos discutidos.

Esta interpretación predice que las atmósferas de supertierras deberían mostrar: (i) razones SO_2/CO_2 menores que las terrestres bajo condiciones redox equivalentes; (ii) menor variabilidad temporal en señales volcánicas (SO_2 transitorio) debido a la episodividad del vulcanismo; y (iii) una mayor fracción de volátiles primordiales (H_2O , CO_2) en relación con volátiles secundarios (desgasificación mantélica) en comparación con planetas de masa terrestre. Observaciones futuras con JWST de supertierras en sistemas tipo TRAPPIST-1 o TOI-700 podrían poner a prueba estas predicciones mediante caracterización espectroscópica temporal de especies como SO_2 (Lincowski et al., 2018; Lustig-Yaeger et al., 2023).

6.4. Conservación elemental y equilibrio químico: implicaciones para la interpretación observacional

Un resultado fundamental de las simulaciones es la conservación de las abundancias elementales H, C y O en el diagrama triangular independientemente de

la temperatura atmosférica (Figuras 5.4, 5.8, 5.10 y 5.12), mientras que las fracciones moleculares (H_2O , CO_2 , CH_4 , etc.) varían significativamente con T y $f\text{O}_2$. Esta propiedad, inherente al equilibrio químico, tiene implicaciones directas para la interpretación de espectros de transmisión y emisión de exoplanetas.

Bajo equilibrio termodinámico, las abundancias moleculares están determinadas por la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema, sujeta a la conservación de elementos y a las restricciones de T y P (Stock et al., 2018; Voitke et al., 2021). Para un conjunto fijo de abundancias H_{tot} , C_{tot} , O_{tot} , la partición entre especies (p. ej., CH_4 vs. CO_2) responde a las constantes de equilibrio $K(T)$ de reacciones clave como:



donde K es la constante de equilibrio de la reacción, ΔG° es la energía libre de Gibbs estándar de reacción, R es la constante de los gases ideales y T la temperatura absoluta. Por lo tanto, variaciones de temperatura redistribuyen las especies moleculares sin alterar H_{tot} , C_{tot} , O_{tot} . Este resultado implica que:

- Dos atmósferas con idénticas abundancias elementales pero diferentes temperaturas producirán espectros moleculares distintos (diferente profundidad de bandas de CH_4 , CO_2 , H_2O), aunque ambas correspondan al mismo punto en el diagrama H-C-O. Esta no unicidad espectral complica la inversión de observaciones: ajustar únicamente abundancias moleculares sin imponer restricciones de equilibrio puede conducir a soluciones no físicas que violan la conservación elemental (Line et al., 2014; Madhusudhan et al., 2014). Estrategias de modelado que impongan equilibrio químico (p. ej., usando FastChem) reducen el espacio de parámetros y mitigan este problema (Mollière et al., 2019; Gandhi and Madhusudhan, 2019).
- La clasificación atmosférica de (Voitke et al., 2021), basada en posiciones en el diagrama H-C-O, es robusta frente a incertidumbres en temperatura si se asume equilibrio químico. Esto contrasta con clasificaciones basadas únicamente en razones moleculares (p. ej., CH_4/CO_2), que son sensibles a T . Por ejemplo, una atmósfera con composición elemental en el dominio tipo C permanecerá clasificada como tal en el rango 600–1000 K, aunque las abundancias de CH_4 y CO_2 varíen órdenes de magnitud. Esta robustez es ventajosa para estudios comparativos de poblaciones de exoplanetas donde T_{eq} varía ampliamente.
- Si observaciones futuras revelan composiciones moleculares que no son compatibles con ningún punto en el diagrama H-C-O bajo equilibrio (p. ej., coexistencia de $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 + \text{O}_2$ en proporciones específicas), ello constituiría evidencia de procesos de desequilibrio como fotoquímica, mezcla vertical rápida o fuentes biológicas (Seager

et al., 2016; Krissansen-Totton et al., 2018). Nuestros resultados de equilibrio proporcionan la línea base contra la cual contrastar dichas detecciones.

6.5. Detectabilidad de firmas volcánicas con JWST: oportunidades y limitaciones

El análisis de detectabilidad (Sección 5.10, Tabla 5.4) demuestra que gases volcánicos clave (SO_2 y CO_2) son accesibles con JWST en sistemas favorables (enanas M compactas tipo TRAPPIST-1) requiriendo 2 tránsitos para SO_2 (banda 7–9 μm , MIRI LRS) y 2–3 tránsitos para CO_2 (banda 4.3 μm , NIRSpec G395H) para detecciones a 5σ . Estas estimaciones asumen amplitudes de señal de ~ 190 ppm derivadas de alturas de escala atmosféricas de ~ 20 km y niveles de ruido instrumental de ~ 100 ppm por canal (Greene et al., 2016; Batalha et al., 2017). La detección reciente de SO_2 en WASP-39b con JWST/MIRI (Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023a) valida la capacidad técnica del instrumento para caracterizar especies volcánicas en atmósferas secundarias. La dependencia de detectabilidad con el estado redox, cuantificada mediante las abundancias predichas por las simulaciones, indica que SO_2 constituye un trazador selectivo de condiciones oxidantes ($\Delta\text{IW} \gtrsim +3$), mientras que CH_4 señala mantos reductores ($\Delta\text{IW} \lesssim 0$).

Tres limitaciones principales pueden degradar la detectabilidad: (i) la actividad estelar en enanas M modula el espectro de transmisión aparente del planeta con amplitudes de 100–500 ppm, generando variaciones espectrales de origen estelar que pueden imitar o enmascarar firmas moleculares genuinamente planetarias (Rackham et al., 2018; Apai et al., 2021); (ii) formación de hazes fotoquímicos que reducen la amplitud efectiva a $\lesssim 1$ –2 alturas de escala, incrementando el número de tránsitos requerido por factores de 5–10 (Loftus et al., 2019; Gao et al., 2020); y (iii) presión superficial elevada ($P_{\text{surf}} > 10$ bar) que comprime verticalmente la atmósfera reduciendo $H \propto 1/P_{\text{surf}}$ y potencialmente situando señales por debajo del umbral de detectabilidad (Koll et al., 2019; Kane et al., 2019). Estrategias de mitigación incluyen selección de estrellas con actividad cromosférica baja y períodos orbitales cortos para acumulación eficiente de tránsitos (Gillon et al., 2017), programas de series temporales multi-época (≥ 5 observaciones) para detectar variabilidad de SO_2 (Ostberg et al., 2023), y combinación de espectroscopía de transmisión y emisión térmica para romper degeneraciones verticales en estructura atmosférica (Kreidberg et al., 2014; Morley et al., 2017). Para sistemas con geometría favorable, estrellas inactivas y atmósferas relativamente claras, la caracterización de firmas volcánicas con JWST es factible, habilitando la conexión observacional entre procesos de desgasificación mantélica y atmósferas exoplanetarias reales.

6.6. Comparación con estudios previos y contexto en la literatura

Nuestros resultados se integran y extienden el marco establecido por (Liggins et al., 2022), quienes desarrollaron EVolve y exploraron el efecto de $f\text{O}_2$ sobre atmósferas de planetas de masa terrestre. Este trabajo amplía ese análisis en dos direcciones clave:

1. **Barrido multiparamétrico sistemático:** Mientras (Liggins et al., 2022) se enfocaron en composiciones mantélicas cercanas a la terrestre y un rango limitado de $f\text{O}_2$ ($\Delta\text{IW} \sim -2$ a $+2$), nuestro estudio explora composiciones con contenidos variables de $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ (ratios de 0.5 a 7) y extiende el rango redox hasta $\Delta\text{IW} = +6$, identificando por primera vez el umbral $\Delta\text{IW} \gtrsim +3$ para atmósferas tipo B bajo condiciones estrictamente geológicas. Esta extensión es relevante porque valores de ΔIW en el rango $+3$ a $+6$, aunque extremos comparados con el manto terrestre actual ($\Delta\text{IW} \sim +4$; (Brachmann et al., 2025)), son teóricamente accesibles en escenarios de diferenciación núcleo-manto en océanos de magma profundos o tras oxidación prolongada por escape de hidrógeno (Rubie et al., 2015; Wordsworth et al., 2018).
2. **Escalamiento con masa planetaria:** La exploración sistemática del efecto de masa ($1-10 M_{\oplus}$) y la derivación del escalamiento $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$ constituyen contribuciones originales de este trabajo. En (Liggins et al., 2022) no abordaron explícitamente el efecto de masa, mientras que estudios geodinámicos previos (Valencia et al., 2007; Kite et al., 2009; Dorn et al., 2018) derivaron escalamientos similares pero no los conectaron con composiciones atmosféricas específicas mediante modelos geoquímicos acoplados. Nuestro hallazgo de menor abundancia de especies sulfuradas en planetas masivos, interpretado como consecuencia de cambios en el régimen tectónico, encuentra paralelos cualitativos en simulaciones 3D de convección mantélica que predicen transición hacia tectónica estancada en supertierras (O'Neill and Lenardic, 2007; Stein et al., 2013; Noack et al., 2017), pero constituye la primera predicción cuantitativa de su efecto sobre especiación atmosférica.

La relación entre estado redox del manto y composición atmosférica ha sido explorada en otros contextos. En (Gaillard and Scaillet, 2014) modelaron la especiación de gases volcánicos terrestres bajo diferentes buffers redox (IW, QFM, NNO) y demostraron el control dominante de $f\text{O}_2$ sobre razones CO_2/CO y $\text{SO}_2/\text{H}_2\text{S}$, consistente con nuestros resultados. Sin embargo, su enfoque se limitó a condiciones terrestres y no extrapoló a atmósferas planetarias completas ni consideró acumulación temporal. En (Schaefer and Fegley, 2010) calcularon composiciones de equilibrio gas-roca para Venus, demostrando que su atmósfera rica en CO_2 es consistente con equilibrio con una superficie basáltica bajo

condiciones de alta temperatura (~ 700 K) y fO_2 intermedia ($\Delta IW \sim +0.5$ a $+2$). Nuestro modelo reproduce cualitativamente este resultado: simulaciones con composiciones tipo-Venus (alto CO_2 inicial, $T \sim 800$ – 1000 K, $\Delta IW \sim +1$) convergen a atmósferas dominadas por CO_2 con trazas de CO y SO_2 (Figuras 5.2 y 5.3).

En el contexto de exoplanetas, varios estudios han modelado atmósferas secundarias mediante diferentes enfoques:

- **Modelos de equilibrio termodinámico:** En (Wordsworth and Kreidberg, 2022) revisaron escenarios de formación de atmósferas secundarias en exoplanetas rocosos, enfatizando la importancia del estado redox, pero sin modelar explícitamente la desgasificación acoplada. En (Miguel et al., 2011) y (Moses et al., 2013) aplicaron equilibrio químico a atmósferas de exoplanetas gaseosos, demostrando transiciones composicionales con temperatura similares en estructura a nuestras transiciones redox-dependientes. La principal diferencia es que en gigantes gaseosos el equilibrio se alcanza en envolturas primordiales dominadas por H_2 , mientras que en planetas rocosos el equilibrio se establece en atmósferas secundarias donde H_2O , CO_2 y N_2 son los componentes principales.
- **Modelos de desgasificación parametrizados:** En (Ortenzi et al., 2020) modelaron atmósferas secundarias de supertierras incorporando desgasificación mantélica, pero con flujos de volátiles prescritos (no acoplados a fusión parcial) y composiciones fijas. Su predicción de atmósferas masivas (~ 10 – 100 bar de CO_2+H_2O) en supertierras es cualitativamente consistente con nuestros resultados, aunque difiere en la especiación detallada por no considerar variaciones de fO_2 . En (Elkins-Tanton and Seager, 2008) exploraron mundos oceánicos (water worlds) formados por desgasificación extrema de H_2O , prediciendo atmósferas de vapor supercrítico con $P_{surf} > 1000$ bar. Nuestras simulaciones, con inventarios de H_2O moderados (200–800 ppm mantélicas), no alcanzan estos extremos, resultando en $P_{surf} \sim 1$ – 50 bar.
- **Modelos fotoquímicos:** En (Hu et al., 2012) y (Wordsworth et al., 2018) demostraron que la fotoquímica UV en atmósferas ricas en CO_2+H_2O puede producir O_2 abiótico a través de la fotólisis de CO_2 seguida del escape de CO , acumulando O_2 en niveles de $\sim 10^{-3}$ – 10^{-2} bar. Este mecanismo opera en escalas de tiempo de 10^8 – 10^9 años y es más eficiente en planetas con baja gravedad y alto flujo de UV. Nuestro modelo, al asumir equilibrio químico sin fotoquímica, no captura este proceso, lo que explica por qué nuestras atmósferas tipo B (con O_2) requieren ΔIW muy altos: el O_2 debe provenir del balance estequiométrico interno, no de fotólisis. La inclusión futura de fotoquímica en EVOlve permitiría explorar la interacción entre desgasificación redox-controlada y producción fotoquímica de O_2 , potencialmente reduciendo el umbral de ΔIW requerido para atmósferas oxidantes.

- **Discrepancias y áreas de debate:** Nuestra predicción de menor contenido de S en supertierras contrasta con el modelo de (Kite et al., 2009), quienes sugirieron que una mayor producción de fundido en planetas masivos debería resultar en una mayor desgasificación total. Esta discrepancia subraya la importancia de distinguir entre la producción de fundido (volumen generado en el manto) y la eficiencia de desgasificación (fracción de volátiles que alcanza la atmósfera), conceptos fundamentalmente distintos y cuya falta de distinción sistemática en la literatura ha llevado a interpretaciones contradictorias. Nuestro marco conceptual (sección 6.3) propone que la eficiencia de desgasificación disminuye con la masa por cambios en régimen tectónico y efectos de presión, reconciliando ambas perspectivas.

Asimismo, el umbral $\Delta IW \gtrsim +3$ para atmósferas tipo B podría parecer inconsistente con modelos que predicen O_2 abiótico en planetas con mantos de fO_2 intermedio ($\Delta IW \sim +1$ a $+2$) si se incluye fotólisis (Wordsworth et al., 2018; Schwieterman et al., 2018). Sin embargo, esta diferencia refleja supuestos distintos: nuestro umbral se aplica al equilibrio gas-roca sin fotoquímica, mientras que esos modelos incorporan procesos atmosféricos radiativos y de escape. Ambos enfoques son complementarios: el nuestro establece el estado base geoquímico, y los modelos fotoquímicos evalúan cómo ese estado evoluciona bajo irradiación estelar.

6.7. Implicaciones para la interpretación de futuras observaciones

Los resultados de este trabajo proporcionan un marco predictivo para interpretar composiciones atmosféricas de exoplanetas rocosos en términos de procesos internos:

- **Inferencia de estado redox desde observaciones:** Si JWST detecta una atmósfera dominada por CO_2+H_2O con SO_2 detectable y CH_4 en trazas ($< 10^{-4}$), ello sería consistente con un manto de fO_2 intermedia-alta ($\Delta IW \sim +1$ a $+3$). Por el contrario, abundancias significativas de CH_4+CO sugieren condiciones reductoras ($\Delta IW < 0$). La razón SO_2/H_2S es particularmente diagnóstica: valores altos ($> 10^2$) indican $\Delta IW > +2$, mientras que razones cercanas a la unidad o menores sugieren $\Delta IW \lesssim 0$ (Gaillard and Scaillet, 2014). Esta información indirecta sobre el estado redox del manto complementaría restricciones de masa y radio, permitiendo modelos de estructura interna más completos (Dorn et al., 2015; Unterborn et al., 2018).
- **Distinción entre fuentes de volátiles:** Atmósferas ricas en H_2 ($> 10^{-2}$ bar) en planetas rocosos señalarían captura de envoltura primordial o entrega tardía por impactos de planetesimales ricos en hielo, en lugar de desgasificación

mantélica (Schlichting et al., 2015; Kite and Schaefer, 2021). Nuestras simulaciones producen H_2 subordinado ($\lesssim 10^{-3}$ bar) incluso bajo condiciones reductoras, consistentes con la desgasificación de mantos oxidados. La detección de H_2 mayoritario requeriría revisión de las composiciones iniciales o la inclusión de fuentes externas.

- **Variabilidad temporal como firma de vulcanismo activo:** Las erupciones episódicas inyectan pulsos de SO_2 que se oxidan fotoquímicamente en escalas de tiempo de semanas a meses, de manera análoga al decaimiento observado tras la erupción del Pinatubo (Bluth et al., 1992). Por ello, la detección de variaciones superiores al 50% en SO_2 entre distintas épocas de observación se consideraría evidencia robusta de actividad volcánica contemporánea (Ostberg et al., 2023). Por el contrario, razones SO_2/CO_2 constantes en múltiples tránsitos indicarían procesos de desgasificación en equilibrio o una atmósfera sin actividad volcánica reciente.
- **Limitaciones en la interpretación de biosignaturas:** La posible coexistencia de O_2+CH_4 en atmósferas con $\Delta\text{IW} \sim +3$ bajo fotoquímica activa (no modelada en este trabajo) advierte contra interpretaciones automáticas de esta combinación como biosignatura (Meadows et al., 2018). Es crítico considerar que un contexto adicional fortalecería la hipótesis biológica, como la presencia de razones extremadamente altas de O_2/CH_4 superiores a 10^6 o la detección de desviaciones del equilibrio fotoquímico predicho (p. ej., exceso de CH_4 que requiere una fuente constante) fortalecerían la hipótesis biológica (Krissansen-Totton et al., 2018). Nuestro trabajo establece el escenario abiótico base contra el cual contrastar estas detecciones.

6.8. Contexto en el Sistema Solar: Venus, Tierra y Marte

Aunque el enfoque de este trabajo es exoplanetario, los planetas terrestres del Sistema Solar proporcionan casos de prueba valiosos para validar el marco conceptual:

- **Venus ($0.82 M_{\oplus}$, $T_{\text{surf}} \sim 735 \text{ K}$, $P_{\text{surf}} = 92 \text{ bar}$):** Atmósfera dominada por CO_2 (96.5%) con N_2 (3.5%) y trazas de SO_2 (~ 150 ppm; (Bullock and Grinspoon, 2013)). El estado redox de la superficie venusina está cerca de ($\Delta\text{IW} \sim +0.5$), inferido de equilibrio con basaltos (Fegley, 2004). Nuestras simulaciones con composiciones ricas en CO_2 , $T \sim 800\text{--}1000 \text{ K}$ y $\Delta\text{IW} \sim +1$ producen atmósferas cualitativamente similares (dominancia de CO_2 , SO_2 subordinado, H_2O en trazas; Figuras 5.2 y 5.3), sugiriendo que el modelo captura adecuadamente la química de atmósferas calientes y oxidadas. Sin embargo, Venus presenta una discrepancia D/H extremadamente alta ($\sim 150\times$ terrestre; (Donahue and Hodges, 1997)), indicativa de escape masivo de H_2O temprano (Kasting, 1988), proceso no incluido en

nuestro modelo. Simulaciones futuras con escape acoplado deberían reproducir este fraccionamiento isotópico como prueba de consistencia.

- **Tierra ($1.0 M_{\oplus}$, $T_{\text{surf}} \sim 288 \text{ K}$, $P_{\text{surf}} = 1 \text{ bar}$):** Atmósfera de N_2 (78 %) + O_2 (21 %) + Ar (0.9 %) con $\text{CO}_2 < 0.04\%$. El O_2 atmosférico terrestre es de origen biológico, acumulado tras la Gran Oxidación hace $\sim 2.4 \text{ Ga}$ (Lyons et al., 2014). El manto terrestre actual tiene $\Delta \text{IW} \sim +4$, capaz de generar atmósferas tipo B bajo nuestro modelo (que requiere $\Delta \text{IW} \gtrsim +3$). Sin embargo, el manto arcaico ($> 3.8 \text{ Ga}$) pudo ser más reducido ($\Delta \text{IW} \sim -4$ a -1 ; (Trail et al., 2011)), lo que habría favorecido desgasificación de $\text{CH}_4 + \text{H}_2$, consistente con evidencia geoquímica de metanogénesis arcaica (Catling et al., 2001). Nuestras simulaciones con $\Delta \text{IW} = -2$ a -1 predicen atmósferas tipo C con CH_4 significativo (Figuras 5.4 y 5.8), análogas a hipótesis de atmósferas arcaicas tempranas (Zahnle et al., 2010; Kasting, 2013).
- **Marte ($0.11 M_{\oplus}$, $T_{\text{surf}} \sim 210 \text{ K}$, $P_{\text{surf}} \sim 0.006 \text{ bar}$):** Atmósfera tenue de CO_2 (95 %) + N_2 (2.7 %) + Ar (1.6 %). Evidencia geomorfológica (valles fluviales, minerales hidratados) indica que Marte primitivo ($> 3.5 \text{ Ga}$) poseía una atmósfera más densa ($P \gtrsim 0.5 \text{ bar}$) y posiblemente agua líquida superficial (Wordsworth et al., 2017; Ramirez and Craddock, 2018). La pérdida de esta atmósfera temprana se atribuye a escape inducido por viento solar post-desaparición del campo magnético global ($\sim 4.0 \text{ Ga}$; (Jakosky et al., 2018)). El estado redox del manto marciano es estimado como $\Delta \text{IW} \sim -1$ a $+1$ (Wadhwa, 2008; Tuff et al., 2013). Nuestras simulaciones para planetas sub-terrestres no fueron realizadas, pero el escalamiento $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$ predice que Marte ($\sim 0.1 M_{\oplus}$) produciría ~ 20 veces menos fundido que la Tierra, consistente con la menor actividad volcánica inferida después del Noeico ($\sim 3.5 \text{ Ga}$; (Carr and Head, 2010)). La combinación de menor desgasificación más escape eficiente explicaría la atmósfera tenue actual de Marte.

6.9. Limitaciones y recomendaciones

El marco desarrollado en este trabajo opera dentro de un dominio de validez definido por varios supuestos y restricciones metodológicas, cuyo reconocimiento es esencial para interpretar los resultados. A continuación, se sintetizan las principales limitaciones del enfoque adoptado y se señalan extensiones concretas para trabajos futuros.

- **Ausencia de fotoquímica y química de no-equilibrio:** EVolve asume equilibrio termodinámico instantáneo en toda la atmósfera. Esta aproximación es válida en atmósferas calientes donde las escalas de tiempo químicas son cortas en comparación con el tiempo de mezcla vertical (Zahnle et al., 2009). Sin embargo, en atmósferas frías ($T < 500 \text{ K}$) y bajo irradiación UV intensa, la fotoquímica en la

alta atmósfera produce especies fuera de equilibrio (O, OH, O₃, etc.) que pueden alterar significativamente las abundancias observables (Hu et al., 2012; Harman et al., 2015). En particular, la fotólisis de H₂O y CO₂ puede generar O₂ abiótico y modificar las razones isotópicas (δD , $\delta^{13}\text{C}$) que servirían como trazadores de procesos evolutivos (Catling and Zahnle, 2020). Extensiones futuras deberían acoplar EVolve con códigos fotoquímicos 1D (p. ej., VULCAN, Photochem; (Tsai et al., 2017; Stock et al., 2022b)) para modelar la transición entre capas profundas en equilibrio y alta atmósfera fotoquímicamente controlada.

- **Escape atmosférico no considerado:** El modelo no incluye pérdida atmosférica por escape térmico o hidrodinámico. En planetas alrededor de enanas M, donde el flujo XUV puede ser 10^2 – 10^3 veces el terrestre durante millones de años debido a la actividad estelar prolongada (Lammer et al., 2018; Luger and Barnes, 2015), el escape puede erosionar atmósferas primordiales y fraccionar isótopos de H, C, N y O (Zahnle and Catling, 2017). Este proceso es crítico para atmósferas ricas en H₂ o H₂O, donde el escape de H enriquece relativamente las especies pesadas y puede oxidar progresivamente la atmósfera residual (Ramirez and Kaltenegger, 2014). La integración de módulos de escape (p. ej., formulaciones de (Lehmer and Catling, 2017; Johnstone et al., 2021)) permitiría evaluar la estabilidad a largo plazo de las atmósferas simuladas y calcular edades límite de detección.
- **Acoplamiento geodinámico simplificado:** La tasa de producción de fundido M_{melt} se escala empíricamente con la masa planetaria ($M^{0.7}$), pero no responde dinámicamente a cambios en la estructura térmica interna, al agotamiento de calor radiogénico o a transiciones de fase minerales que ocurren a lo largo de millones de años. Modelos de convección mantélica 2D/3D, como StagYY o ASPECT, calculan explícitamente la evolución de la temperatura, la viscosidad, la fusión parcial y el régimen tectónico de forma autoconsistente (Tackley, 2000; Noack et al., 2017). El acoplamiento bidireccional entre EVolve y modelos geodinámicos, donde la desgasificación modifica la reología y el clima superficial (que a su vez afecta el enfriamiento mantélico), representa una frontera de modelación que permitiría abordar la coevolución interior-atmósfera de forma completa (Foley and Driscoll, 2016).
- **Composiciones mantélicas iniciales inciertas:** Las abundancias de volátiles adoptadas (Tabla 5.1) se basan en estimaciones terrestres y en el modelo de (Liggins et al., 2022), pero la composición real de los mantos exoplanetarios es desconocida y probablemente diversa. Variaciones en la razón C/O del disco protoplanetario, la ubicación de formación relativa y la historia de impactos determinan inventarios iniciales que pueden diferir significativamente de los terrestres (Öberg et al., 2011; Mordasini et al., 2016). Estudios futuros deberían parametrizar sistemáticamente este espacio y conectar composiciones con modelos de formación planetaria para

identificar cuáles escenarios son más probables en diferentes regiones de discos protoplanetarios.

- **Limitaciones experimentales y observacionales:** Los coeficientes de partición y las leyes de solubilidad empleados se basan mayoritariamente en experimentos a $P < 10$ GPa, representativos del manto superior terrestre, pero no del manto profundo de supertierras, donde P puede exceder 100 GPa (Valencia et al., 2006). Su extrapolación a altas presiones introduce incertidumbres sistemáticas asociadas a cambios de coordinación en los fundidos (Sanloup, 2016), estabilización de fases minerales de alta presión que secuestran volátiles (Irifune and Tsuchiya, 2007; Pamato et al., 2015) y variaciones en la especiación redox de elementos multivalentes (S, C) que afectan la partición (Beermann and Zakhrova, 2017); en consecuencia, las predicciones para $M \gtrsim 3 M_{\oplus}$ deben interpretarse con especial cautela. De forma complementaria, la validación empírica de las atmósferas modeladas está restringida por las capacidades observacionales actuales: incluso con JWST, la detección de firmas moleculares se limita a sistemas particularmente favorables, requiere tiempos de integración elevados y se ve afectada por ruido instrumental, actividad estelar de amplitud $\sim 100\text{--}500$ ppm y atenuación por nubes y hazes que pueden situar las señales por debajo de los umbrales de detectabilidad (Greene et al., 2016; Rackham et al., 2018; Loftus et al., 2019; Gao et al., 2020; Apai et al., 2021; Lustig-Yaeger et al., 2023). Una estrategia útil consiste en desarrollar bibliotecas públicas de espectros sintéticos que cubran el espacio de parámetros explorado e incluyan parametrizaciones sencillas de nubes/hazes, de modo que sirvan como banco de pruebas para algoritmos de inversión y guíen el diseño de estrategias observacionales eficientes con JWST y futuros observatorios (Batalha et al., 2019).

6.10. Síntesis de la discusión

El análisis de conservación elemental bajo equilibrio químico demuestra que las abundancias totales de H, C y O en el sistema atmósfera-manto se mantienen constantes independientemente de la temperatura atmosférica, mientras que las fracciones moleculares experimentan redistribuciones significativas en respuesta a variaciones de temperatura y fugacidad de oxígeno (Stock et al., 2018; Woitke et al., 2021). Esta propiedad fundamental, derivada de la minimización de la energía libre de Gibbs sujeta a la conservación de masa, implica que la posición de una atmósfera en el diagrama triangular H-C-O depende exclusivamente de las abundancias elementales totales y del estado redox del manto, no de la temperatura a la cual se alcanza el equilibrio termodinámico. Como consecuencia directa, atmósferas con composición elemental idéntica pero temperaturas

diferentes producirán espectros moleculares distintos, manifestándose en profundidades de banda variables para H₂O, CO₂ y CH₄, entre otras especies. Esta degeneración temperatura-composición debe considerarse explícitamente en estrategias de inversión de datos espectrales, sugiriendo que las aproximaciones basadas en equilibrio químico—que reducen el espacio de parámetros al imponer restricciones estequiométricas—son preferibles a ajustes de abundancias moleculares sin restricciones (Madhusudhan, 2019). La clasificación atmosférica propuesta por (Woitke et al., 2021), fundamentada en coordenadas H-C-O, resulta robusta frente a incertidumbres térmicas, proporcionando un marco conceptual estable para estudios comparativos de poblaciones exoplanetarias en los que la temperatura de equilibrio varía ampliamente.

El estado redox del manto, expresado como desviación del buffer hierro-wüstita (ΔIW), emerge como el parámetro de control dominante sobre la especiación atmosférica final. Las simulaciones revelan que únicamente escenarios con $\Delta IW > +3$ logran generar atmósferas de tipo B—caracterizadas por dominancia de O₂, H₂O, CO₂ y N₂—bajo condiciones estrictamente geológicas, es decir, sin considerar procesos fotoquímicos, escape de hidrógeno o actividad biológica. Este umbral refleja un límite termodinámico impuesto por la capacidad oxidativa del sistema gas-roca en equilibrio: valores de ΔIW inferiores resultan invariablemente en atmósferas tipo C (donde H₂O, CO₂, CH₄ y N₂ coexisten como componentes mayoritarios) o tipo A (dominadas por H₂ y CH₄ con CO₂ en menor abundancia), dependiendo del balance estequiométrico particular entre hidrógeno, carbono y oxígeno (Schaefer and Fegley, 2010; Gaillard and Scaillet, 2014). La identificación de este umbral constituye una contribución original del presente estudio y establece una línea base geoquímica para evaluar escenarios de producción abiótica de oxígeno molecular en exoplanetas rocosos. Debe enfatizarse que $\Delta IW > +3$ representa una condición necesaria pero no suficiente para la acumulación de O₂ atmosférico en niveles comparables a los terrestres actuales: aunque esta condición redox preconditiona el sistema reduciendo el flujo de especies reductoras emitidas volcánicamente, la generación de reservorios sustanciales de O₂ requiere mecanismos adicionales como la fotodisociación de H₂O en capas superiores de la atmósfera acompañada de escape preferencial de hidrógeno hacia el espacio (Luger and Barnes, 2015; Meadows et al., 2018).

Esta distinción posee implicaciones directas para la interpretación de potenciales biosignaturas en exoplanetas rocosos. La posibilidad de generar O₂ mediante la combinación específica de mantos altamente oxidados, fotoquímica activa bajo irradiación ultravioleta intensa y abundancias particulares de H/C/O advierte contra interpretaciones automáticas de la detección de oxígeno molecular o de la coexistencia O₂+CH₄ como indicadores inequívocos de metabolismo biológico (Schwieterman et al., 2018). Los resultados del presente trabajo proporcionan el escenario abiótico de referencia contra el cual contrastar futuras observaciones, subrayando la necesidad de caracterización multiparamétrica—incluyendo razones de abundancia, perfiles verticales de concentración

y análisis de variabilidad temporal—para el diagnóstico robusto de actividad biológica. Desde una perspectiva observacional, las razones moleculares CO_2/CO , $\text{SO}_2/\text{H}_2\text{S}$ y la presencia o ausencia de CH_4 en combinación con H_2O y CO_2 constituyen trazadores diagnósticos del estado redox mantélico que son accesibles mediante espectroscopía de transmisión y emisión con el Telescopio Espacial James Webb (Greene et al., 2016). Esta caracterización indirecta de la fugacidad de oxígeno interior complementaría restricciones de masa y radio derivadas de fotometría de tránsito y velocidad radial, permitiendo la construcción de modelos de estructura interna más completos y estableciendo, por primera vez, un vínculo cuantitativo entre observables atmosféricos superficiales y procesos geodinámicos que operan en el manto (Dorn et al., 2015; Unterborn et al., 2018).

El efecto de la masa planetaria sobre la desgasificación y la composición atmosférica resultante exhibe una complejidad que trasciende el escalamiento térmico simple. La derivación del escalamiento $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$ a partir de leyes de convección del manto (ecuación 5.16) establece que planetas más masivos generan mayores volúmenes de material fundido en su interior, con un planeta de $10 M_{\oplus}$ produciendo aproximadamente cinco veces más fundido que la Tierra bajo condiciones térmicas comparables. Este resultado es consistente con modelos geodinámicos previos (Valencia et al., 2007; Kite et al., 2009) y proporciona una parametrización cuantitativa del presupuesto de volátiles potencialmente disponibles para desgasificación. Sin embargo, las simulaciones revelan una tendencia composicional aparentemente contradictoria: planetas de $10 M_{\oplus}$ exhiben sistemáticamente menor abundancia de especies portadoras de azufre— SO_2 , H_2S y S_2 —en comparación con planetas de $1 M_{\oplus}$ bajo condiciones iniciales equivalentes de composición mantélica y estado redox. Esta anti-correlación entre la masa planetaria y el contenido atmosférico de volátiles sulfurados se interpreta como el resultado sinérgico de tres mecanismos físicos complementarios.

En primer lugar, los modelos geodinámicos sugieren que el incremento de masa favorece la transición desde regímenes de tectónica de placas móviles hacia tectónica estancada o episódica, debido al aumento del estrés de fluencia litosférico con la gravedad superficial, al incremento de la viscosidad efectiva del manto por efectos de presión y al engrosamiento de la litosfera por enfriamiento conductivo más eficiente (O'Neill and Lenardic, 2007; Noack et al., 2017; Dorn et al., 2018). En regímenes de tectónica estancada, la ausencia de reciclaje litosférico continuo limita la conectividad entre el manto y la superficie, concentrando el vulcanismo en eventos episódicos de gran magnitud separados por prolongados períodos de inactividad volcánica (Madhusudhan, 2019). Aunque la cantidad total de fundido producido en el manto sea elevada, su transferencia efectiva hacia la atmósfera resulta severamente reducida, manifestándose en tasas eruptivas globales atenuadas y, consecuentemente, en un aporte volcánico neto de volátiles inferior al predicho por el escalamiento térmico simple.

En segundo lugar, las presiones litostáticas elevadas características de mantos de

supertierras, superiores a 25 GPa en planetas de $10 M_{\oplus}$, comparadas con aproximadamente 13 GPa en la discontinuidad núcleo-manto terrestre (Valencia et al., 2006) modifican sustancialmente la solubilidad y especiación de volátiles en fases minerales profundas. Para el azufre específicamente, estudios experimentales indican que la capacidad de sulfuro del manto disminuye a presiones superiores a 10 GPa, favoreciendo la partición de S hacia sulfuros metálicos que permanecen secuestrados en el manto o migran hacia el núcleo metálico (Madhusudhan, 2019). Adicionalmente, en condiciones de alta presión y alta fugacidad de oxígeno, el azufre puede estabilizarse como sulfatos en fases minerales accesorias, removiéndolo del reservorio disponible para exsolución durante la fusión parcial (Jégo and Pichavant, 2012). Estos efectos se amplifican si los mantos de supertierras experimentan transiciones de fase minerales adicionales que pueden incorporar volátiles en su estructura cristalina (Irifune and Tsuchiya, 2007).

En tercer lugar, la especiación redox del azufre en magmas depende fuertemente tanto de la fugacidad de oxígeno como de la presión. A presiones bajas típicas del manto terrestre superior, incrementos en f_{O_2} desplazan el azufre hacia formas oxidadas gaseosas que desgasifican eficientemente durante la erupción (Métrich and Mandeville, 2010). Sin embargo, a las presiones elevadas de supertierras, la estabilidad de sulfatos disueltos en el fundido aumenta, compitiendo con la liberación gaseosa de SO_2 , y la solubilidad de especies sulfuradas en magmas silicatados se incrementa, reduciendo la fracción que exsolve durante el ascenso (Beermann and Zakharova, 2017; Moussallam et al., 2016). La integración de estos tres mecanismos sugiere que el escalamiento térmico $M_{melt} \propto M^{0.7}$ describe la producción interna de material fundido pero no captura la eficiencia de transferencia de ese fundido y los volátiles que contiene hacia la atmósfera. En supertierras, el cambio de régimen tectónico actúa como un filtro que limita la conectividad manto-atmósfera, mientras que los efectos de alta presión reducen la abundancia de azufre disponible para exsolución y la fracción que se libera durante la erupción.

Esta interpretación encuentra respaldo indirecto en estudios comparativos del Sistema Solar, donde Venus ($0.82 M_{\oplus}$) y la Tierra mantienen una actividad volcánica significativa y atmósferas enriquecidas en volátiles de origen mantélico, mientras que Marte ($0.11 M_{\oplus}$) exhibe evidencia de vulcanismo antiguo, pero tiene aportes atmosféricos contemporáneos limitados debido a su menor tamaño y enfriamiento temprano (Greeley and Spudis, 1981; Grott et al., 2011). Aunque esta comparación se restringe al rango de masa sub-terrestre, sugiere la existencia de una ventana óptima de masa planetaria, estimada entre 0.5 y $1.5 M_{\oplus}$, donde la combinación de producción suficiente de fundido y tectónica activa sostenida maximiza la transferencia de volátiles desde el manto hacia la atmósfera, mientras que los planetas significativamente más masivos experimentarían atenuación de desgasificación por los mecanismos discutidos anteriormente. Esta predicción es potencialmente contrastable mediante observaciones futuras que caractericen las razones SO_2/CO_2 en función de la masa planetaria en muestras estadísticas de exoplanetas rocosos, proporcionando una prueba observacional de la

hipótesis de acoplamiento entre el régimen tectónico y la eficiencia de desgasificación.

El análisis de detectabilidad de gases volcánicos con el Telescopio Espacial James Webb demuestra que especies clave— SO_2 y CO_2 —predichas por las simulaciones con EVOlve son técnicamente accesibles en configuraciones favorables de sistemas planetarios (Tabla 5.5). Para los planetas rocosos que orbitan enanas M compactas del tipo espectral de TRAPPIST-1, las estimaciones cuantitativas indican que se requieren 2 tránsitos para SO_2 (banda 7 a 9 μm , MIRI LRS) y de 2 a 3 tránsitos para CO_2 (banda 4.3 μm , NIRSpec G395H) para alcanzar detecciones a nivel de 5σ , asumiendo amplitudes de señal de aproximadamente 189 ppm derivadas de alturas de escala atmosféricas de 20 km y niveles conservadores de ruido instrumental de 100 ppm por canal espectral (Greene et al., 2016; Batalha et al., 2017). Estas estimaciones corresponden a atmósferas con alto estado redox mantélico ($\Delta\text{IW} \sim +6$), representativas del extremo oxidante del espacio de parámetros explorado. La validación observacional reciente, mediante la detección de SO_2 en WASP-39b con JWST/MIRI (Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023a), confirma la capacidad técnica del instrumento para caracterizar especies volcánicas en atmósferas secundarias. Sin embargo, la extrapolación desde gigantes gaseosos hacia planetas rocosos requiere una consideración cuidadosa de las diferencias en altura de escala (~ 20 km vs. ~ 1000 km).

La dependencia de la detectabilidad con el estado redox, cuantificada mediante las abundancias predichas por las simulaciones para diferentes valores de ΔIW , indica que SO_2 constituye un trazador selectivo de condiciones oxidantes ($\Delta\text{IW} \gtrsim +3$), requiriendo de 4 a 6 tránsitos para una detección robusta en el umbral identificado para atmósferas tipo B ($\Delta\text{IW} = +3$, fracción molar $\text{SO}_2 \sim 5\%$) y requiriendo >10 tránsitos para alcanzar el umbral de detección bajo oxidación intermedia ($\Delta\text{IW} \sim +1$ a $+2$, $\text{SO}_2 \sim 1\%$). Por el contrario, CH_4 solo alcanza abundancias detectables bajo condiciones reductoras ($\Delta\text{IW} \lesssim 0$, fracciones molares 1–10%), generando señales de 20–100 ppm en su banda de 3.3 μm observable con NIRSpec. La detección o no-detección de CH_4 en combinación con CO_2 proporciona una restricción binaria sobre el estado redox: la presencia de CH_4 implica un manto reductor ($\Delta\text{IW} < 0$), mientras que la ausencia de CO_2 detectable implica un manto intermedio-oxidante ($\Delta\text{IW} \gtrsim +1$). La caracterización multiespecie mediante la observación simultánea de las ventanas 3.3 μm (CH_4), 4.3 μm (CO_2) y 7–9 μm (SO_2) permite, en principio, discriminar entre los tres regímenes redox identificados en las simulaciones (reductor, intermedio, oxidante), estableciendo por primera vez un vínculo diagnóstico entre los observables atmosféricos superficiales y los procesos geodinámicos del interior planetario profundo.

Este trabajo establece que la evolución de atmósferas secundarias originadas por desgasificación mantélica está controlada por tres parámetros planetarios fundamentales. El estado redox del manto, expresado como ΔIW , organiza la especiación molecular mediante control termodinámico de equilibrios redox y determina la clase atmosférica final

(A, B o C) bajo el esquema de clasificación de (Woitke et al., 2021). La masa planetaria modula tanto la producción volumétrica de fundido en el interior como la eficiencia de transferencia de ese fundido y sus volátiles hacia la superficie, con planetas masivos experimentando atenuación de desgasificación efectiva a pesar de presupuestos térmicos elevados. Las abundancias elementales iniciales de H, C y O en el manto, reflejados en razones como H_2O/CO_2 y C/O total, fijan la posición del sistema en el diagrama triangular H-C-O y establecen límites estequiométricos sobre las composiciones atmosféricas alcanzables bajo equilibrio. La jerarquía de estos controles sugiere que caracterización observacional relativamente básica, espectroscopía de especies moleculares diagnósticas (H_2O , CO_2 , CH_4 , SO_2 , H_2S) combinada con restricciones fotométricas de masa y radio, puede, en principio, restringir significativamente el espacio de parámetros internos del planeta, informando modelos de estructura y evolución de forma cuantitativa.

La relación establecida entre fugacidad de oxígeno mantélica y tipo atmosférico permite, por primera vez, la inferencia indirecta de propiedades redox del interior planetario profundo desde observaciones de la composición atmosférica superficial. Aunque esta capacidad está sujeta a las limitaciones inherentes del modelo, específicamente la asunción de equilibrio químico sin fotoquímica, la ausencia de escape atmosférico y el acoplamiento simplificado con la geodinámica interna, habilita un nuevo eje observacional para la caracterización de exoplanetas rocosos que trasciende los métodos tradicionales basados exclusivamente en masa y radio. Estos últimos proporcionan restricciones sobre la composición del planeta (fracciones relativas de núcleo metálico, manto silicatado y corteza) pero no acceden directamente al estado químico de esos reservorios. Observaciones futuras con JWST de muestras estadísticas de planetas rocosos en zona habitable podrán poner a prueba las predicciones derivadas de este estudio mediante análisis de correlaciones entre razones moleculares diagnósticas y parámetros físicos fundamentales.

7. Conclusiones

Este trabajo ha explorado la evolución de atmósferas secundarias generadas por desgasificación volcánica en exoplanetas rocosos mediante simulaciones numéricas con el código E Volve . A través de un barrido sistemático del espacio de parámetros que comprende masa planetaria ($1-10 M_{\oplus}$), composición mantélica (razones H_2O/CO_2 de 0.5 a 7), estado redox del manto (ΔIW de -2 a $+6$) y temperatura atmosférica ($600-1000$ K), se han identificado controles de primer orden sobre la especiación química y se han establecido umbrales operativos para la clasificación de atmósferas desgasificadas. Los resultados permiten formular las siguientes conclusiones principales.

En relación con la determinación de composiciones atmosféricas y su clasificación,

las simulaciones mostraron que las atmósferas secundarias generadas por desgasificación volcánica convergen mayoritariamente hacia atmósferas tipo C (dominadas por H₂O, CO₂, CH₄ y N₂) para estados redox moderados, caracterizados por $\Delta IW < +3$. Únicamente los escenarios con $\Delta IW \geq +3$ alcanzaron atmósferas tipo B (con O₂, H₂O, CO₂ y N₂ como componentes principales), mientras que las atmósferas tipo A (dominadas por H₂ y CH₄) se obtuvieron exclusivamente bajo condiciones fuertemente reductoras ($\Delta IW \leq -1$). Este umbral redox en torno a $\Delta IW \approx +3$ se establece como un límite teórico que separa dos regímenes composicionales distintos bajo procesos estrictamente geológicos. La conservación de las abundancias elementales de H, C y O en el diagrama triangular resultó independiente de la temperatura atmosférica (600–1000 K), lo que confirma que la posición final en el espacio H–C–O depende principalmente del estado redox del manto y de las abundancias elementales iniciales. En contraste, las fracciones moleculares (CH₄, CO₂, H₂O) sí presentaron variaciones significativas con la temperatura, que se manifiestan como cambios en la especiación molecular sin alterar la clase atmosférica final.

En cuanto al efecto de la masa planetaria sobre la desgasificación, el escalamiento derivado para la producción de material fundido, $M_{\text{melt}} \propto M^{0.7}$, predice que un planeta de 10 M_⊕ genera aproximadamente cinco veces más fundido que la Tierra. No obstante, las simulaciones revelaron una anti-correlación entre la masa planetaria y la abundancia atmosférica de especies sulfuradas: los planetas de 10 M_⊕ mostraron menores contenidos de SO₂, H₂S y S₂ en comparación con planetas de 1 M_⊕ bajo condiciones iniciales equivalentes. Este resultado indica que la eficiencia de transferencia de volátiles desde el manto hacia la atmósfera disminuye con la masa planetaria. Las comparaciones directas entre 1 y 10 M_⊕ evidenciaron que las especies reducidas ricas en C y N (CH₄, C₂H₂, NH₃, HCN) tienden a enriquecerse en planetas más masivos, mientras que las especies oxidadas de azufre (SO₂, S₂) y el oxígeno molecular se concentran preferentemente en planetas de masa terrestre. De forma consistente, la altura de escala atmosférica disminuyó con la masa ($H \propto M^{-0.46}$), dando lugar a atmósferas geoméricamente más comprimidas en exoplanetas con mayor masa.

Respecto a la detectabilidad con el Telescopio Espacial James Webb (JWST), el análisis cuantitativo para un sistema análogo a TRAPPIST-1 mostró que SO₂ y CO₂ son especies accesibles observacionalmente en atmósferas con altos estados redox mantélicos. Para el escenario de máxima oxidación explorado ($\Delta IW = +6$, composición final: 57.5% H₂O, 21.6% SO₂, 20.1% CO₂), se requieren dos tránsitos para detectar SO₂ a 5 σ con MIRI LRS (ventana 7–9 μm) y del orden de 2–3 tránsitos para CO₂ con NIRSpec G395H (banda de 4.3 μm), asumiendo amplitudes de señal de ~ 189 ppm y un ruido instrumental de 100 ppm por canal. La detectabilidad mostró una fuerte dependencia del estado redox: SO₂ se comporta como un trazador selectivo de condiciones oxidantes ($\Delta IW \geq +3$), requiriendo entre 4 y 6 tránsitos en el umbral de atmósferas tipo B y más de 10 tránsitos bajo oxidación intermedia ($\Delta IW \sim +1$ a $+2$). Por su parte, CH₄ sólo alcanza abundancias detectables bajo condiciones reductoras ($\Delta IW \leq 0$), generando señales de 20–100 ppm en

3.3 μm . La caracterización multiespecie de las ventanas en 3.3 μm (CH_4), 4.3 μm (CO_2) y 7–9 μm (SO_2) permite discriminar de forma observacional entre los tres regímenes redox identificados (reductor, intermedio y oxidante).

En el contexto más amplio de la caracterización de exoplanetas rocosos, este estudio proporciona cuatro contribuciones principales. En primer lugar, establece un marco cuantitativo reproducible para predecir composiciones atmosféricas secundarias desgasificadas como función de parámetros planetarios fundamentales, permitiendo la generación de bibliotecas espectrales sintéticas para planificación observacional y análisis de poblaciones. En segundo lugar, identifica umbrales operativos específicos, particularmente $\Delta\text{IW} \gtrsim +3$ para atmósferas de tipo B bajo procesos geológicos, que pueden emplearse como hipótesis en la interpretación de detecciones de oxígeno molecular o de combinaciones potencialmente biogénicas como O_2+CH_4 . En tercer lugar, formula predicciones contrastables sobre el efecto de la masa planetaria en la especiación de volátiles volcánicos, específicamente la anti-correlación predicha entre masa y abundancia de especies sulfuradas, que puede verificarse mediante caracterización espectroscópica de muestras de supertierras confirmadas. En cuarto lugar, proporciona estimaciones realistas de detectabilidad con JWST fundamentadas en composiciones atmosféricas autoconsistentes derivadas de primeros principios geoquímicos, que pueden guiar la asignación de tiempo de observación en ciclos futuros y la priorización de blancos en función de criterios científicos cuantitativos. En conjunto, estos resultados establecen una base física para la interpretación geoquímica de atmósferas exoplanetarias y demuestran el potencial de la espectroscopía atmosférica como herramienta diagnóstica para sondear procesos que operan en el interior planetario, estableciendo un vínculo entre observaciones astronómicas superficiales y procesos geodinámicos fundamentales.

Referencias Bibliográficas

- Acocella, V. (2021). *Volcano-tectonic processes*, volume 567. Springer.
- Alderson, L., Grant, D., Radica, M., and otros (2023a). Detection of sulfur dioxide and other molecules in wasp-39b with jwst/miri. *Astronomy & Astrophysics*, 678:A180.
- Alderson, L., Wakeford, H. R., Alam, M. K., Batalha, N. E., Lothringer, J. D., Adams Redai, J., Barat, S., Brande, J., Damiano, M., Daylan, T., et al. (2023b). Early release science of the exoplanet wasp-39b with jwst nirspec g395h. *Nature*, 614(7949):664–669.
- Apai, D., Rackham, B. V., Giampapa, M. S., Angerhausen, D., Teske, J., Barstow, J., Carone, L., Casewell, S. L., Cowan, N. B., Crossfield, I. J. M., Gao, P., Knutson, H. A., Kreidberg, L., Morley, C. V., Stevenson, K. B., and Zellem, R. T. (2021). Understanding Stellar Contamination in Exoplanet Transmission Spectra as an Essential Step in Small Planet Characterization. *The Astrophysical Journal*, 906(1):64.
- Ardia, P., Hirschmann, M. M., Withers, A. C., and Stanley, B. D. (2013). Solubility of ch_4 in a synthetic basaltic melt, with applications to atmosphere–magma ocean–core partitioning of volatiles and to the evolution of the martian atmosphere. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 114:52–71.
- Armstrong, L. S., Hirschmann, M. M., Stanley, B. D., Falksen, E. G., and Jacobsen, S. D. (2015). Speciation and solubility of reduced c–o–h–n volatiles in mafic melt: Implications for volcanism, atmospheric evolution, and deep volatile cycles in the terrestrial planets. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 171:283–302.
- Aubaud, C., Hauri, E. H., and Hirschmann, M. M. (2004). Hydrogen partition coefficients between nominally anhydrous minerals and basaltic melts. *Geophysical Research Letters*, 31(20):L20611.
- Bandfield, J. L., Hamilton, V. E., and Christensen, P. R. (2000). A global view of martian surface compositions from mgs-tes. *Science*, 287(5458):1626–1630.
- Barboni, M., Boehnke, P., Keller, B., Kohl, I. E., Schoene, B., Young, E. D., and McKeegan, K. D. (2017). Early formation of the moon 4.51 billion years ago. *Science advances*, 3(1):e1602365.

- Batalha, N. E., Lewis, N. K., Line, M. R., Valenti, J., and Stevenson, K. (2018). Strategies for constraining the atmospheres of temperate terrestrial planets with jwst. *The Astrophysical Journal Letters*, 856(2):L34.
- Batalha, N. E., Lewis, N. K., Line, M. R., Valenti, J., and Stevenson, K. (2019). Exoplanet Reflected-light Spectroscopy with PICASO. *The Astrophysical Journal*, 878(1):70.
- Batalha, N. E., Mandell, A., Pontoppidan, K., Stevenson, K. B., Lewis, N. K., Kalirai, J., Earl, N., Greene, T., Albert, L., and Nielsen, L. D. (2017). PandExo: A Community Tool for Transiting Exoplanet Science with JWST & HST. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 129(976):064501.
- Beermann, O. and Zakharova, E. (2017). Sulfur solubility in peridotitic and basaltic melts at upper mantle conditions. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 172(6):49.
- Beichman, C., Benneke, B., Knutson, H., Smith, R., Lagage, P.-O., Dressing, C., Latham, D., Lunine, J., Birkmann, S., Ferruit, P., et al. (2014). Observations of transiting exoplanets with the james webb space telescope (jwst). *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 126(946):1134.
- Bleacher, J. E., Greeley, R., Williams, D. A., Cave, S. R., and Neukum, G. (2007). Trends in effusive style at the tharsis montes, mars, and implications for the development of the tharsis province. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 112(E9).
- Bluth, G. J. S., Doiron, S. D., Schnetzler, C. C., Krueger, A. J., and Walter, L. S. (1992). Global tracking of the so₂ clouds from the june, 1991 mount pinatubo eruptions. *Geophysical Research Letters*, 19(2):151–154.
- Bondarenko, N., Head, J., and Ivanov, M. (2010). Present-day volcanism on venus: Evidence from microwave radiometry. *Geophysical Research Letters*, 37(23).
- Boujibar, A., Andrault, D., Bouhifd, M. A., Bolfan-Casanova, N., Devidal, J.-L., and Trcera, N. (2014). Metal–silicate partitioning of sulphur, new experimental and thermodynamic constraints on planetary accretion. *Earth and Planetary Science Letters*, 391:42–54.
- Brachmann, C., Noack, L., Baumeister, P. A., and Sohl, F. (2025). Distinct types of c-h-o-n atmospheres and surface pressures depending on melt redox state and outgassing efficiency. *Icarus*, 429:116450.
- Brand, B. D., Pollock, N., Vallance, J. W., Ongaro, T. E., Roche, O., Trolese, M., Giordano, G., Marshall, A. A., and Criswell, C. W. (2023). Advances in our understanding of pyroclastic current behavior from the 1980 eruption sequence of mount st. helens volcano (washington), usa. *Bulletin of Volcanology*, 85(4):24.

- Brož, P., Bernhardt, H., Conway, S. J., and Parekh, R. (2021). An overview of explosive volcanism on mars. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 409(107125):107125.
- Brož, P., Čadek, O., Hauber, E., and Rossi, A. P. (2015). Scoria cones on mars: Detailed investigation of morphometry based on high-resolution digital elevation models. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 120(9):1512–1527.
- Bullock, M. A. and Grinspoon, D. H. (2013). The climate of venus. In Bougher, S. W., Genova, D., Haberle, R. M., Murphy, J. R., and Titov, D. V., editors, *Comparative Climatology of Terrestrial Planets*, pages 3–28. University of Arizona Press.
- Burgisser, A., Alletti, M., and Scaillet, B. (2015). Simulating the behavior of volatiles belonging to the c–o–h–s system in silicate melts under magmatic conditions with the software d-compress. *Computers & Geosciences*, 79:1–14.
- Byrne, P. K., Whitten, J. L., Klimczak, C., McCubbin, F. M., and Ostrach, L. R. (2018). The volcanic character of mercury. *Mercury. The View after MESSENGER*, pages 287–323.
- Callegaro, S., Geraki, K., Marzoli, A., De Min, A., Maneta, V., and Baker, D. R. (2020). The quintet completed: The partitioning of sulfur between nominally volatile-free minerals and silicate melts. *American Mineralogist*, 105(5):697–707.
- Carr, M. H. and Head, J. W. (2010). Geologic history of mars. *Earth and Planetary Science Letters*, 294(3–4):185–203.
- Casadevall, T. J., Delos Reyes, P., and Schneider, D. J. (1996). The 1991 pinatubo eruptions and their effects on aircraft operations. *Fire and Mud: eruptions and lahars of Mount Pinatubo, Philippines*, pages 625–636.
- Cashman, K. V. and Sparks, R. S. J. (2013). How volcanoes work: A 25 year perspective. *Bulletin*, 125(5-6):664–690.
- Castillo-Rogez, J., Neveu, M., McSween, H. Y., Fu, R. R., Toplis, M. J., and Prettyman, T. (2018). Insights into ceres’s evolution from surface composition. *Meteoritics & Planetary Science*, 53(9):1820–1843.
- Catling, D. C. and Kasting, J. F. (2017). *Atmospheric Evolution on Inhabited and Lifeless Worlds*. Cambridge University Press.
- Catling, D. C. and Zahnle, K. J. (2020). The rise of oxygen in earth’s early ocean and atmosphere. *Science Advances*, 6(15):eaax1420.
- Catling, D. C., Zahnle, K. J., and McKay, C. P. (2001). Biogenic methane, hydrogen escape, and the irreversible oxidation of early earth. *Science*, 293(5531):839–843.

- Charnay, B. and Drossart, P. (2023). Characterization and modelling of exoplanetary atmospheres. *Comptes Rendus. Physique*, 24(S2):1–11.
- Che, X., Nemchin, A., Liu, D., Long, T., Wang, C., Norman, M. D., Joy, K. H., Tartese, R., Head, J., Jolliff, B., et al. (2021). Age and composition of young basalts on the moon, measured from samples returned by chang'e-5. *Science*, 374(6569):887–890.
- Cole-Dai, J. (2010). Volcanoes and climate. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Climate Change*, 1(6):824–839.
- Crisp, J. A. (1984). Rates of magma emplacement and volcanic output. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 20(3–4):177–211.
- Cuartas-Restrepo, P. (2018). Planetary magnetic fields and habitability in super earths. *Open Astronomy*, 27(1):183–231.
- Davies, A. (2010). Terrestrial lava lake physical parameter estimation using a silicate cooling model-implications for a return to the volcanic moon, io. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, page 5659.
- de Pater, I., Keane, J. T., de Kleer, K., and Davies, A. G. (2021). A 2020 observational perspective of io. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 49:643–678.
- Deng, Q., Li, F., Yan, J., Xiao, Z., Ye, M., Xiao, C., and Barriot, J.-P. (2020). The thermal evolution of mercury over the past 4.2 ga as revealed by relaxation states of mantle plugs beneath impact basins. *Geophysical Research Letters*, 47(20):e2020GL089051.
- Donahue, T. M. and Hodges, R. R. (1997). Venus atmospheric evolution. In Bougher, S. W., Hunten, D. M., and Phillips, R. J., editors, *Venus II*, pages 385–414. University of Arizona Press.
- Dorn, C., Khan, A., Heng, K., Connolly, J. A. D., Alibert, Y., Benz, W., and Tackley, P. (2015). Can we constrain the interior structure of rocky exoplanets from mass and radius measurements? *Astronomy & Astrophysics*, 577:A83.
- Dorn, C., Lichtenberg, T., Hinkel, N. R., Bower, D. J., Meier, T., Gerya, T., Venturini, J., Alibert, Y., and Benz, W. (2018). Outgassing of rocky planets: Volatile retention and secondary atmosphere formation. *Astronomy & Astrophysics*, 614:A18.
- Eguchi, J. and Dasgupta, R. (2018). A CO_2 solubility model for silicate melts from fluid saturation to graphite or diamond saturation. *Chemical Geology*, 487:23–28.
- Elkins-Tanton, L. T. and Seager, S. (2008). Rapid formation of a steam atmosphere from magma ocean outgassing: Implications for super-earths. *The Astrophysical Journal*, 685(2):1237–1246.

- Esposito, L. W. (1984). Sulfur dioxide: Episodic injection shows evidence for active venus volcanism. *Science*, 223(4640):1072–1074.
- Fassett, C. I., Kadish, S. J., Head, J. W., Solomon, S. C., and Strom, R. G. (2011). The global population of large craters on mercury and comparison with the moon. *Geophysical Research Letters*, 38(10).
- Fegley, B. (2004). Venus: Atmospheric composition and chemistry. *Icarus*, 167(2):177–180.
- Filiberto, J., Trang, D., Treiman, A. H., and Gilmore, M. S. (2020). Present-day volcanism on venus as evidenced from weathering rates of olivine. *Science Advances*, 6(1):eaax7445.
- Foley, B. J. and Driscoll, P. E. (2016). Geodynamic and geochemical models of the coevolution of plate tectonics, climate, and habitability on earth-like planets. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 17(6):1885–1904.
- Gaillard, F. and Scaillet, B. (2014). A theoretical framework for volcanic degassing chemistry in a comparative planetology perspective. *Earth and Planetary Science Letters*, 403:307–316.
- Gandhi, S. and Madhusudhan, N. (2019). Retrieval of Exoplanet Atmospheres with petitRADTRANS. *The Astronomical Journal*, 158(6):228.
- Gao, P., Thorngren, D. P., Lee, G. K. H., Fortney, J. J., Morley, C. V., Libby-Roberts, J. E., Kataria, T., Batalha, N. E., Stevenson, K. B., Wakeford, H. R., Mullally, F., Beatty, T. G., Kempton, E. M.-R., Rauscher, E., Bean, J. L., Tolento, V., Parmentier, V., Carter, A. L., Ballester, G. E., Arcangeli, J., Moran, S. E., Sing, D. K., dos Santos, L. A., and Nikolov, N. K. (2020). Aerosol composition of hot giant exoplanets dominated by silicates and hydrocarbon hazes. *Nature Astronomy*, 4:951–956.
- Ge, Y. and Gao, X. (2020). Understanding the overestimated impact of the toba volcanic super-eruption on global environments and ancient hominins. *Quaternary International*, 559:24–33.
- Geissler, P. (2015). Cryovolcanism in the outer solar system. In *The encyclopedia of volcanoes*, pages 763–776. Elsevier.
- Gillmann, C. and Tackley, P. (2014). Atmosphere/mantle coupling and feedbacks on Venus. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 119(6):1189–1217.
- Gillon, M., Triaud, A. H. M. J., Demory, B.-O., Jehin, E., Agol, E., Deck, K. M., Lederer, S. M., de Wit, J., Burdanov, A., Ingalls, J. G., Bolmont, E., Leconte, J., Raymond, S. N., Selsis, F., Turbet, M., Barkaoui, K., Burgasser, A., Burleigh, M. R., Carey, S. J.,

- Chaushev, A., Copperwheat, C. M., Delrez, L., Fernandes, C. S., Holdsworth, D. L., Kotze, E. J., Van Grootel, V., Almléaky, Y., Benkhaldoun, Z., Magain, P., and Queloz, D. (2017). Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1. *Nature*, 542(7642):456–460.
- Greeley, R. and Spudis, P. D. (1981). Volcanism on Mars. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 19(1):13–41.
- Greene, T. P., Line, M. R., Montero, C., Fortney, J. J., Lustig-Yaeger, J., and Luther, K. (2016). Characterizing Transiting Exoplanet Atmospheres with JWST. *The Astrophysical Journal*, 817(1):17.
- Grimm, S. L., Demory, B. O., Gillon, M., et al. (2018). The nature of the trappist-1 exoplanets. *Astronomy & Astrophysics*, 613:A68.
- Grott, M., Morschhauser, A., Breuer, D., and Hauber, E. (2011). Volcanic outgassing of CO₂ and H₂O on Mars. *Earth and Planetary Science Letters*, 308(3–4):391–400.
- Gülcher, A. J. P., Gerya, T. V., Montési, L. G. J., and Munch, J. (2020). Corona structures driven by plume–lithosphere interactions and evidence for ongoing plume activity on Venus. *Nature Geoscience*, 13(8):547–554.
- Halliday, A. N. (2000). Terrestrial accretion rates and the origin of the moon. *Earth and Planetary Science Letters*, 176(1):17–30.
- Harman, C. E., Schwieterman, E. W., Schottelkotte, J. C., and Kasting, J. F. (2015). Abiotic ozone and oxygen in atmospheres similar to prebiotic earth. *The Astrophysical Journal*, 812(2):137.
- Head, J. W., Crumpler, L., Aubele, J. C., Guest, J. E., and Saunders, R. S. (1992). Venus volcanism: Classification of volcanic features and structures, associations, and global distribution from magellan data. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 97(E8):13153–13197.
- Head, J. W. and Wilson, L. (2017). Generation, ascent and eruption of magma on the moon: New insights into source depths, magma supply, intrusions and effusive/explosive eruptions (part 2: Predicted emplacement processes and observations). *Icarus*, 283:176–223.
- Hirschmann, M. M. (2012). Constraining bulk volatile concentrations in planetary interiors. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 40:251–275.
- Holloway, J. R. (1987). Igneous fluids. In Carmichael, I. S. E. and Eugster, H. P., editors, *Thermodynamic Modeling of Geologic Materials: Minerals, Fluids, and Melts*, pages 211–234. De Gruyter, Berlin, Boston.

- Horvath, D. G., Moitra, P., Hamilton, C. W., Craddock, R. A., and Andrews-Hanna, J. C. (2021). Evidence for geologically recent explosive volcanism in elysium planitia, mars. *Icarus*, 365:114499.
- Hu, R., Seager, S., and Bains, W. (2012). Photochemistry in terrestrial exoplanet atmospheres. i. photolysis rates, reaction constants, and equilibrium abundances. *The Astrophysical Journal*, 752(1):7.
- Huang, J. and Xiao, L. (2014). Knobby terrain on ancient volcanoes as an indication of dominant early explosive volcanism on mars. *Geophysical Research Letters*, 41(20):7019–7024.
- Irifune, T. and Tsuchiya, T. (2007). Mineralogy of the earth – phase transitions and mineralogy of the lower mantle. *Treatise on Geophysics*, 2:33–62.
- Jakosky, B. M., Slipski, M., Benna, M., Mahaffy, P., Elrod, M., Yelle, R., Stone, S., and Alsing, J. (2018). Mars' atmospheric history derived from upper-atmosphere measurements of $^{38}\text{Ar}/^{36}\text{Ar}$. *Icarus*, 315:146–157.
- Johnson, T. V., Veeder, G. J., Matson, D. L., Brown, R. H., Nelson, R. M., and Morrison, D. (1988). Io: Evidence for silicate volcanism in 1986. *Science*, 242(4883):1280–1283.
- Johnstone, C. P., Güdel, M., Luger, R., Lammer, H., Kulikov, Y. N., Kubyschkina, D., Fossati, L., Shaikhislamov, I. F., and Khodachenko, M. L. (2021). Extreme-uv stellar winds and planet mass-loss rates. *Astronomy & Astrophysics*, 649:A96.
- Jégo, S. and Pichavant, M. (2012). Gold solubility in arc magmas: Experimental determination of the effect of sulfur at 1000°C and 4.0 gpa. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 84:560–592.
- Kaltenegger, L., Henning, W. G., and Sasselov, D. D. (2010). DETECTING VOLCANISM ON EXTRASOLAR PLANETS. *The Astronomical Journal*, 140(5):1370–1380.
- Kane, S. R., Kopparapu, R. K., and Domagal-Goldman, S. D. (2019). On the frequency of potential venus analogs from kepler data. *The Astrophysical Journal Letters*, 794:L5.
- Kargel, J. (1994). Cryovolcanism on the icy satellites. *Earth, Moon, and Planets*, 67(1):101–113.
- Kasting, J. F. (1988). Runaway and moist greenhouse atmospheres and the evolution of earth and venus. *Icarus*, 74(3):472–494.
- Kasting, J. F. (2013). *How to Find a Habitable Planet*. Princeton University Press.
- Kasting, J. F., Egger, D. H., and Raeburn, S. P. (1993). Mantle Redox Evolution and the Case for a Reduced Archean Atmosphere. *The Journal of Geology*, 101(2):245–257.

- Keane, J. T., de Kleer, K., Rathbun, J., Ahern, A., and Radebaugh, J. (2018). Comprehensive spherical harmonic analysis of the distribution of io's volcanoes, mountains, heat flow, and other geologic phenomena. In *AGU Fall Meeting Abstracts*, volume 2018, pages P53C–2983.
- Kelley, K. A. and Cottrell, E. (2009). Water and the oxidation state of subduction zone magmas. *Science*, 325(5942):60.
- Kerber, L., Head, J. W., Solomon, S. C., Murchie, S. L., Blewett, D. T., and Wilson, L. (2009). Explosive volcanic eruptions on mercury: Eruption conditions, magma volatile content, and implications for interior volatile abundances. *Earth and Planetary Science Letters*, 285(3-4):263–271.
- Keszthelyi, L., McEwen, A., Phillips, C., Milazzo, M., Geissler, P., Turtle, E., Radebaugh, J., Williams, D., Simonelli, D., Breneman, H., et al. (2001). Imaging of volcanic activity on jupiter's moon io by galileo during the galileo europa mission and the galileo millennium mission. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 106(E12):33025–33052.
- Kite, E. S., Manga, M., and Gaidos, E. (2009). Geodynamics and rate of volcanism on massive earth-like planets. *The Astrophysical Journal*, 692(2):1279–1296.
- Kite, E. S. and Schaefer, L. (2021). Geochemical constraints on planetary habitability. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 49:367–393.
- Koll, D. D. B., Malik, M., Mansfield, M., Kempton, E. M.-R., Kite, E., Abbot, D., and Bean, J. L. (2019). Identifying Candidate Atmospheres on Rocky M Dwarf Planets via Eclipse Photometry. *The Astrophysical Journal*, 886(2):140.
- Kreidberg, L., Bean, J. L., Désert, J.-M., Benneke, B., Deming, D., Stevenson, K. B., Seager, S., Berta-Thompson, Z., Seifahrt, A., and Homeier, D. (2014). Clouds in the atmosphere of the super-Earth exoplanet GJ 1214b. *Nature*, 505(7481):69–72.
- Kress, V. C. and Carmichael, I. S. E. (1991). The compressibility of silicate liquids containing fe_2O_3 and the effect of composition, temperature, oxygen fugacity and pressure on their redox states. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 108:82–92.
- Krissansen-Totton, J., Schwieterman, E. W., Charnay, B., Arney, G. N., Robinson, T. D., Meadows, V. S., and Catling, D. C. (2018). Is the pale blue dot unique? optimized photometric bands for identifying earth-like exoplanets. *The Astronomical Journal*, 155(3):137.
- Lammer, H., Zarka, P., Grießmeier, J.-M., Odert, P., Leitzinger, M., Khodachenko, M. L., Kulikov, Y. N., Kislyakova, K. G., Lichtenegger, H. I. M., and Johnstone, C. P. (2018). Origin and evolution of planetary atmospheres. *Space Science Reviews*, 214:31.

- Lehmer, O. J. and Catling, D. C. (2017). Xuv-driven mass loss from extrasolar giant planets orbiting active stars. *Icarus*, 284:307–318.
- Li, Y., Dasgupta, R., and Tsuno, K. (2017). Carbon contents in reduced basalts at graphite saturation: Implications for the degassing of mars, mercury, and the moon. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 122:1300–1320.
- Li, Y., Wiedenbeck, M., Shcheka, S., and Keppler, H. (2013). Nitrogen solubility in upper mantle minerals. *Earth and Planetary Science Letters*, 377:311–323.
- Libourel, G., Marty, B., and Humbert, F. (2003). Nitrogen solubility in basaltic melt. part i. effect of oxygen fugacity. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 67(21):4123–4135.
- Liggins, P., Jordan, S., Rimmer, P. B., and Shorttle, O. (2022). Growth and evolution of secondary volcanic atmospheres: I. identifying the geological character of hot rocky planets. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 127(7):e2021JE007123.
- Liggins, P. K., Jordan, S., and Shorttle, O. (2020). Can volcanism build hydrogen-rich early atmospheres? *Earth and Planetary Science Letters*, 541:116283.
- Lincowski, A. P., Meadows, V. S., Lustig-Yaeger, J., Robinson, T. D., Misra, A., and Arney, G. N. (2018). The role of oxygen in the evolution of the atmospheres of earth-like exoplanets. *The Astronomical Journal*, 156(6):290.
- Line, M. R., Knutson, H., Wolf, A. S., and Yung, Y. L. (2014). A Systematic Retrieval Analysis of Secondary Eclipse Spectra. II. A Uniform Analysis of Nine Planets and their C to O Ratios. *The Astrophysical Journal*, 783(2):70.
- Loftus, K., Wordsworth, R. D., and Morley, C. V. (2019). Sulfate Aerosol Hazes and SO₂ Gas as Constraints on Rocky Exoplanets' Surface Liquid Water. *The Astrophysical Journal*, 887(2):231.
- Luger, R. and Barnes, R. (2015). Extreme Water Loss and Abiotic O₂ Buildup on Planets Throughout the Habitable Zones of M Dwarfs. *Astrobiology*, 15(2):119–143.
- Lustig-Yaeger, J., Lincowski, A. P., Luger, R., Arney, G. N., Robinson, T. D., Domagal-Goldman, S. D., and Meadows, V. S. (2023). The detectability and characterization of the trappist-1 exoplanet atmospheres with jwst. *The Astronomical Journal*, 165(1):31.
- Lyons, T. W., Reinhard, C. T., and Planavsky, N. J. (2014). The rise of oxygen in earth's early ocean and atmosphere. *Nature*, 506(7488):307–315.
- Madhusudhan, N. (2019). Exoplanetary Atmospheres: Key Insights, Challenges, and Prospects. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 57(1):617–663. _eprint: <https://doi.org/10.1146/annurev-astro-081817-051846>.

- Madhusudhan, N., Knutson, H., Fortney, J. J., and Barman, T. (2014). Protostars and Planets VI: Exoplanetary Atmospheres. *Protostars and Planets VI*, pages 739–762.
- Marcq, E., Bertaux, J.-L., Montmessin, F., and Belyaev, D. (2013). Variations of sulphur dioxide at the cloud top of venus’s dynamic atmosphere. *Nature geoscience*, 6(1):25–28.
- McCoy, T. J., Peplowski, P. N., McCubbin, F. M., and Weider, S. Z. (2018). The geochemical and mineralogical diversity of mercury. *Mercury. The View after MESSENGER*, pages 176–190.
- Meadows, V. S., Arney, G. N., Schwieterman, E. W., Lustig-Yaeger, J., Lincowski, A. P., Kozakis, T., Luger, R., Robinson, T. D., Domagal-Goldman, S. D., and Walker, C. C. (2018). The habitability of proxima centauri b: Environmental states and observational discriminants. *Astrobiology*, 18(2):133–189.
- Métrich, N., Allard, P., Spilliaert, N., Andronico, D., and Burton, M. (2004). 2001 flank eruption of the alkali- and volatile-rich primitive basalt responsible for Mount Etna’s evolution in the last three decades. *Earth and Planetary Science Letters*, 228(1–2):1–17.
- Métrich, N. and Mandeville, C. W. (2010). Sulfur in Magmas. *Elements*, 6(2):81–86.
- Michalski, J. R. and Bleacher, J. E. (2013). Supervolcanoes within an ancient volcanic province in arabia terra, mars. *Nature*, 502(7469):47–52.
- Miguel, Y., Kaltenecker, L., Fegley Jr, B., and Schaefer, L. (2011). Composition of hot jupiters: Atmospheres and interior evolution. *The Astrophysical Journal*, 742(1):1–15.
- Milazzo, M. P., Keszthelyi, L. P., Radebaugh, J., Davies, A. G., Turtle, E. P., Geissler, P., Klaasen, K. P., Rathbun, J. A., and McEwen, A. S. (2005). Volcanic activity at tvastar catena, io. *Icarus*, 179(1):235–251.
- Miller, C. F. and Wark, D. A. (2008). Supervolcanoes and their explosive supereruptions. *Elements*, 4(1):11–15.
- Mollière, P., Wardenier, J. P., van Boekel, R., Henning, T., Molaverdikhani, K., and Snellen, I. A. G. (2019). petitRADTRANS: A Python Radiative Transfer Package for Exoplanet Characterization and Retrieval. *Astronomy & Astrophysics*, 627:A67.
- Mordasini, C., Alibert, Y., Georgy, C., Jin, S., Venturini, J., Bekkelien, A., and Benz, W. (2016). Planetary population synthesis coupled to 3d radiation hydrodynamics. *Astronomy & Astrophysics*, 592:A73.
- Morley, C. V., Kreidberg, L., Rustamkulov, Z., Robinson, T., and Fortney, J. J. (2017). Observing the Atmospheres of Known Temperate Earth-sized Planets with JWST. *The Astrophysical Journal*, 850(2):121.

- Morschhauser, A., Grott, M., and Breuer, D. (2011). Crustal recycling, mantle dehydration, and the thermal evolution of Mars. *Icarus*, 212(2):541–558.
- Moses, J. I., Visscher, C., Fortney, J. J., Showman, A. P., Lewis, N. K., Griffith, C. A., Klippenstein, S. J., Shabram, M., Friedson, A. J., Marley, M. S., and Freedman, R. S. (2013). The composition of hot jupiters: Chemical abundances and atmospheric models. *The Astrophysical Journal*, 763(1):25.
- Moussallam, Y., Edmonds, M., Scaillet, B., Peters, N., Gennaro, E., Sides, I., and Oppenheimer, C. (2016). The impact of degassing on the oxidation state of basaltic magmas: A case study of Kīlauea volcano. *Earth and Planetary Science Letters*, 450:317–325.
- Murchie, S. L., Klima, R. L., Izenberg, N. R., Domingue, D. L., Blewett, D. T., and Helbert, J. (2018). Spectral reflectance constraints on the composition and evolution of mercury's surface. *Mercury. The View after MESSENGER*, pages 191–216.
- Namur, O., Collinet, M., Charlier, B., Grove, T. L., Holtz, F., and McCammon, C. (2016). Melting processes and mantle sources of lavas on Mercury. *Earth and Planetary Science Letters*, 439:117–128.
- Newhall, C. G. and Self, S. (1982). The volcanic explosivity index (vei) an estimate of explosive magnitude for historical volcanism. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 87(C2):1231–1238.
- Noack, L., Höning, D., and Breuer, D. (2017). Volcanism and outgassing of water on super-earths. *Astronomy & Astrophysics*, 601:A29.
- Öberg, K. I., Murray-Clay, R., and Bergin, E. A. (2011). Formation and evolution of ices in the solar nebula. *The Astrophysical Journal Letters*, 740(1):L11.
- Ody, A., Poulet, F., Langevin, Y., Bibring, J.-P., Bellucci, G., Altieri, F., Gondet, B., Vincendon, M., Carter, J., and Manaud, N. (2012). Global maps of anhydrous minerals at the surface of mars from omega/mex. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 117(E11).
- O'Neill, C. and Lenardic, A. (2007). Geological consequences of super-sized earths. *Geophysical Research Letters*, 34(19):L19204.
- O'Neill, H. S. C. (2021). The thermodynamic controls on sulfide saturation in silicate melts with application to ocean floor basalts. In Moretti, R. and Neuville, D. R., editors, *Magma Redox Geochemistry*, volume 266 of *Geophysical Monograph Series*, pages 177–213. Wiley & American Geophysical Union, Hoboken, NJ.

- Oppenheimer, C. (2003). Climatic, environmental and human consequences of the largest known historic eruption: Tambora volcano (indonesia) 1815. *Progress in physical geography*, 27(2):230–259.
- Ortenzi, G., Noack, L., Sohl, F., Katyal, N., Grenfell, J. L., Godolt, M., Wunderlich, F., and Rauer, H. (2020). Mantle redox state drives outgassing chemistry and atmospheric composition of rocky planets. *Science Advances*, 6(24):eaba1032.
- Ostberg, C. M., Guzewich, S. D., Kane, S. R., Kohler, E., Oman, L. D., Fauchez, T. J., Koppappu, R. K., Richardson, J., and Whelley, P. (2023). The Prospect of Detecting Volcanic Signatures on an ExoEarth Using Direct Imaging. arXiv:2309.15972 [astro-ph].
- Pamato, M. G., Myhill, R., Boffa Ballaran, T., Frost, D. J., Heidelbach, F., and Miyajima, N. (2015). Lower-mantle water reservoir implied by the extreme stability of a hydrous aluminosilicate. *Nature Geoscience*, 8:75–79.
- Paragas, K., Knutson, H. A., Hu, R., Ehlmann, B. L., Alemanno, G., Helbert, J., Maturilli, A., Zhang, M., Iyer, A., and Rossman, G. (2025). A new spectral library for modeling the surfaces of hot, rocky exoplanets. *The Astrophysical Journal*, 981(2):130.
- Pontoppidan, K. M., Barrientes, J., Blome, C., Braun, H., Brown, M., Carruthers, M., Coe, D., DePasquale, J., Espinoza, N., Marin, M. G., et al. (2022). The jwst early release observations. *The Astrophysical Journal Letters*, 936(1):L14.
- Qian, Y., She, Z., He, Q., Xiao, L., Wang, Z., Head, J. W., Sun, L., Wang, Y., Wu, B., Wu, X., et al. (2023). Mineralogy and chronology of the young mare volcanism in the procellarum-kreep-terrane. *Nature Astronomy*, 7(3):287–297.
- Quick, L. C., Glaze, L. S., and Baloga, S. M. (2017). Cryovolcanic emplacement of domes on europa. *Icarus*, 284:477–488.
- Rackham, B. V., Apai, D., and Giampapa, M. S. (2018). The Transit Light Source Effect: False Spectral Features and Incorrect Densities for M-dwarf Transiting Planets. *The Astrophysical Journal*, 853(2):122.
- Ramirez, R. M. and Craddock, R. A. (2018). The geologic history of mars and its implications for habitability. *Earth and Planetary Science Letters*, 481:20–29.
- Ramirez, R. M. and Kaltenegger, L. (2014). The habitable zones around main sequence stars: Dependence on planetary mass. *The Astrophysical Journal Letters*, 797(2):L25.
- Robbins, S. J., Di Achille, G., and Hynes, B. M. (2011). The volcanic history of mars: High-resolution crater-based studies of the calderas of 20 volcanoes. *Icarus*, 211(2):1179–1203.

- Rogers, A. D. and Christensen, P. R. (2007). Surface mineralogy of martian low-albedo regions from mgs-tes data: Implications for upper crustal evolution and surface alteration. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 112(E1).
- Rosenthal, A., Hauri, E. H., and Hirschmann, M. M. (2015). Experimental determination of c, f, and h partitioning between mantle minerals and carbonated basalt, co₂/ba and co₂/nb systematics of partial melting, and the co₂ contents of basaltic source regions. *Earth and Planetary Science Letters*, 412:77–87.
- Rothman, L. S., Gordon, I. E., Babikov, Y., Barbe, A., Chris Benner, D., Bernath, P. F., Birk, M., Bizzocchi, L., Boudon, V., Brown, L. R., Campargue, A., Chance, K., Cohen, E. A., Coudert, L. H., Devi, V. M., Drouin, B. J., Fayt, A., Flaud, J.-M., Gamache, R. R., Harrison, J. J., Hartmann, J.-M., Hill, C., Hodges, J. T., Jacquemart, D., Jolly, A., Lamouroux, J., Le Roy, R. J., Li, G., Long, D. A., Lyulin, O. M., Mackie, C. J., Massie, S. T., Mikhailenko, S., Müller, H. S. P., Naumenko, O. V., Nikitin, A. V., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Polovtseva, E. R., Richard, C., Smith, M. A. H., Starikova, E., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Toon, G. C., Tyuterev, V. G., and Wagner, G. (2013). The HITRAN2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130:4–50.
- Rubie, D. C., Jacobson, S. A., Morbidelli, A., O'Brien, D. P., Young, E. D., de Vries, J., Nimmo, F., Palme, H., and Frost, D. J. (2015). Accretion and differentiation of the terrestrial planets with implications for the compositions of early planetary atmospheres and interiors. *Icarus*, 248:89–108.
- Rustamkulov, Z., Sing, D. K., Mukherjee, S., May, E. M., Kirk, J., Schlawin, E., Line, M. R., Piaulet, C., Carter, A. L., Batalha, N. E., Goyal, J. M., López-Morales, M., Gibson, N. P., MacDonald, R. J., Nikolov, N. K., Stevenson, K. B., Wakeford, H. R., Espinoza, N., Bean, J. L., Batalha, N. M., Benneke, B., Berta-Thompson, Z. K., Crossfield, I. J. M., Gao, P., Kreidberg, L., López-Morales, M., Morley, C. V., Welbanks, L., Aggarwal, K., Ahrer, E.-M., Allen, N. H., Barstow, J. K., Bell, T. J., Blecic, J., Brande, J., Casewell, S., Changeat, Q., Chubb, K. L., Crouzet, N., Cubillos, P. E., Decin, L., Feinstein, A. D., Fortney, J. J., Harrington, J., Heng, K., Iro, N., Kempton, E. M.-R., Krick, J., Lendl, M., Mancini, L., Mansfield, M., Mayne, N. J., Miguel, Y., Mollière, P., Nixon, M. C., Palle, E., Rackham, B. V., Redfield, S., Rogers, L. K., Tan, X., Tremblin, P., Tsai, S.-M., Turner, J. D., de Val-Borro, M., Venot, O., Wheatley, P. J., and Xi, S. (2023). Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec G395H. *Nature*, 614:659–663.
- Sanloup, C. (2016). Density of magmas at depth. *Chemical Geology*, 429:51–59.
- Schaefer, L. and Fegley, B. (2010). Stabilities of noble gases and other volatiles in the atmospheres of venus and earth. *Icarus*, 208(1):438–447.

- Schenk, P. M., McKinnon, W. B., Gwynn, D., and Moore, J. M. (2001). Flooding of ganymede's bright terrains by low-viscosity water-ice lavas. *Nature*, 410(6824):57–60.
- Schlichting, H. E., Sari, R., and Yalinewich, A. (2015). Atmospheric mass loss by stellar wind from terrestrial planets around sun-like stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 448(2):1058–1066.
- Schwieterman, E. W., Kiang, N. Y., Parenteau, M. N., Harman, C. E., DasSarma, S., Fisher, T. M., Arney, G. N., Hartnett, H. E., Reinhard, C. T., Olson, S. L., Meadows, V. S., Cockell, C. S., Walker, S. I., Grenfell, J. L., Hegde, S., Rugheimer, S., Hu, R., and Lyons, T. W. (2018). Exoplanet Biosignatures: A Review of Remotely Detectable Signs of Life. *Astrobiology*, 18(6):663–708.
- Seager, S., Bains, W., and Petkowski, J. J. (2016). Toward a List of Molecules as Potential Biosignature Gases for the Search for Life on Exoplanets and Applications to Terrestrial Biochemistry. *Astrobiology*, 16(6):465–485.
- Seager, S., Kuchner, M., Hier-Majumder, C. A., and Militzer, B. (2007). Mass-radius relationship for solid exoplanets. *The Astrophysical Journal*, 669(2):1279–1297.
- Seager, S. and Lissauer, J. J. (2010). Introduction to exoplanets. *Exoplanets*, pages 3–13.
- Siebert, L., Cottrell, E., Venzke, E., and Andrews, B. (2015). Earth's volcanoes and their eruptions: An overview. *The encyclopedia of volcanoes*, pages 239–255.
- Sigurdsson, H., Houghton, B., McNutt, S., Rymer, H., and Stix, J. (2015). *The encyclopedia of volcanoes*. Elsevier.
- Smrekar, S. E., Stofan, E. R., Mueller, N., Treiman, A., Elkins-Tanton, L., Helbert, J., Piccioni, G., and Drossart, P. (2010). Recent hotspot volcanism on venus from virtis emissivity data. *Science*, 328(5978):605–608.
- Sossi, P. A., Burnham, A. D., O'Neill, H. S. C., Rubie, D. C., Badro, J., and Langenhorst, F. (2020). Redox state of earth's magma ocean and its venus-like early atmosphere. *Science Advances*, 6(48):eabd1387.
- Stamenković, V., Noack, L., Breuer, D., and Spohn, T. (2012). The influence of pressure-dependent viscosity on the thermal evolution of super-Earths. *The Astrophysical Journal*, 748(1):41.
- Stein, C., Stein, J., Sizova, E., and Hansen, U. (2013). How plate tectonics and mantle convection may change with planet mass. *Earth and Planetary Science Letters*, 368:21–31.

- Stock, J. W., Kitzmann, D., and Patzer, A. B. C. (2022a). Fastchem 2: an improved computer program to determine the gas-phase chemical equilibrium composition for arbitrary element distributions. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 517(3):4070–4080.
- Stock, J. W., Kitzmann, D., Patzer, A. B. C., and Sedlmayr, E. (2018). Fastchem: A computer program for efficient complex chemical equilibrium calculations in the neutral/ionized gas phase with applications to stellar and planetary atmospheres. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 479(1):865–874.
- Stock, J. W., Kitzmann, D., Patzer, A. B. C., and Sedlmayr, E. (2022b). Photochem: A python package for photochemical modeling of earth-like exoplanet atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, 660:A141.
- Stockstill-Cahill, K. R., McCoy, T. J., Nittler, L. R., Weider, S. Z., and Hauck, S. A. (2012). Magnesium-rich crustal compositions on mercury: Implications for magmatism from petrologic modeling. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 117(E12).
- Stofan, E. R., Sharpton, V. L., Schubert, G., Baer, G., Bindschadler, D. L., Janes, D. M., and Squyres, S. W. (1992). Global distribution and characteristics of coronae and related features on venus: Implications for origin and relation to mantle processes. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 97(E8):13347–13378.
- Swingedouw, D., Mignot, J., Ortega, P., Khodri, M., Menegoz, M., Cassou, C., and Hanquiez, V. (2017). Impact of explosive volcanic eruptions on the main climate variability modes. *Global and Planetary Change*, 150:24–45.
- Tackley, P. J. (2000). Mantle convection and plate tectonics: Toward an integrated physical and chemical theory. *Science*, 288(5473):2002–2007.
- Tanaka, K. L., Skinner, J. A., Dohm, J. M., Irwin, III, R. P., Kolb, E. J., Fortezzo, C. M., Platz, T., Michael, G. G., and Hare, T. M. (2014). Geologic map of mars.
- Terada, K., Anand, M., Sokol, A. K., Bischoff, A., and Sano, Y. (2007). Cryptomare magmatism 4.35 kyr ago recorded in lunar meteorite kalahari 009. *Nature*, 450(7171):849–852.
- Thomas, R. J., Rothery, D. A., Conway, S. J., and Anand, M. (2014). Long-lived explosive volcanism on mercury. *Geophysical Research Letters*, 41(17):6084–6092.
- Thomas, R. J., Rothery, D. A., Conway, S. J., and Anand, M. (2015). Explosive volcanism in complex impact craters on mercury and the moon: Influence of tectonic regime on depth of magmatic intrusion. *Earth and Planetary Science Letters*, 431:164–172.

- Thordarson, T. and Larsen, G. (2007). Volcanism in iceland in historical time: Volcano types, eruption styles and eruptive history. *Journal of Geodynamics*, 43(1):118–152.
- Trail, D., Watson, E. B., and Tailby, N. D. (2011). The oxidation state of Hadean magmas and implications for early Earth's atmosphere. *Nature*, 480(7375):79–82.
- Tsai, S.-M., Chen, H., Kitzmann, D., and Heng, K. (2017). Vulcan: An open-source, validated chemical kinetics python code for exoplanetary atmospheres. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 228(2):20.
- Tuff, J., Wade, J., and Wood, B. J. (2013). The effect of oxygen fugacity on the solubility of sulfur in silicate melts. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 109:263–278.
- Turcotte, D. L. and Schubert, G. (2002). *Geodynamics*. Cambridge University Press, 2nd edition.
- Unterborn, C. T., Desch, S. J., Hinkel, N. R., and Kabbes, J. E. (2018). Inward migration of the trappist-1 planets as inferred from their water-rich compositions. *Nature Astronomy*, 2:297–302.
- Valencia, D., O'Connell, R. J., and Sasselov, D. D. (2006). Internal structure of massive terrestrial planets. *Icarus*, 181(2):545–554.
- Valencia, D., O'Connell, R. J., and Sasselov, D. D. (2007). Inevitability of Plate Tectonics on Super-Earths. *The Astrophysical Journal*, 670(1):L45–L48.
- Veeder, G. J., Davies, A. G., Matson, D. L., Johnson, T. V., Williams, D. A., and Radebaugh, J. (2015). Io: Heat flow from small volcanic features. *Icarus*, 245:379–410.
- Veeder, G. J., Matson, D. L., Johnson, T. V., Blaney, D. L., and Goguen, J. D. (1994). Io's heat flow from infrared radiometry: 1983–1993. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 99(E8):17095–17162.
- Wadhwa, M. (2008). Redox conditions on mars: Evidence from martian meteorites. *Meteoritics & Planetary Science*, 43(4):515–524.
- Wang, Y., Xiao, Z., Chang, Y., Xu, R., and Cui, J. (2021). Short-term and global-wide effusive volcanism on mercury around 3.7 ga. *Geophysical Research Letters*, 48(20):e2021GL094503.
- Weider, S. Z., Nittler, L. R., Murchie, S. L., Peplowski, P. N., McCoy, T. J., Kerber, L., Klimczak, C., Ernst, C. M., Goudge, T. A., Starr, R. D., et al. (2016). Evidence from messenger for sulfur-and carbon-driven explosive volcanism on mercury. *Geophysical Research Letters*, 43(8):3653–3661.

- Werner, S. C. (2009). The global martian volcanic evolutionary history. *Icarus*, 201(1):44–68.
- Whitten, J. L. and Head, J. W. (2015). Lunar cryptomaria: Physical characteristics, distribution, and implications for ancient volcanism. *Icarus*, 247:150–171.
- Whitten, J. L., Head, J. W., Denevi, B. W., and Solomon, S. C. (2014). Intercrater plains on mercury: Insights into unit definition, characterization, and origin from messenger datasets. *Icarus*, 241:97–113.
- Woitke, P., Herbort, O., Helling, C., Stüeken, E., Dominik, M., Barth, P., and Samra, D. (2021). Coexistence of ch₄, co₂, and h₂o in exoplanet atmospheres. *Astronomy & Astrophysics*, 646:A43.
- Wordsworth, R., Kerber, L., and Pierrehumbert, R. T. (2017). The climate of early mars. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 45:107–130.
- Wordsworth, R. and Kreidberg, L. (2022). Atmospheres of Rocky Exoplanets. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 60(1):159–201. arXiv:2112.04663 [astro-ph].
- Wordsworth, R., Schaefer, L., and Fischer, R. (2018). Abiotic oxygen-dominated atmospheres on terrestrial habitable zone planets. *The Astrophysical Journal Letters*, 856(1):L10.
- Xiao, L., Huang, J., Christensen, P. R., Greeley, R., Williams, D. A., Zhao, J., and He, Q. (2012). Ancient volcanism and its implication for thermal evolution of mars. *Earth and Planetary Science Letters*, 323:9–18.
- Xiao, L., Huang, J., Xiao, Z., Qi, C., and Qian, Y. (2023). Volcanism in the solar system. *Science China Earth Sciences*, 66(11):2419–2440.
- Xiao, Z., Xu, R., Wang, Y., Chang, Y., Xu, R., and Cui, J. (2021). Recent dark pyroclastic deposits on mercury. *Geophysical Research Letters*, 48(9):e2021GL092532.
- Yin, Q., Jacobsen, S., Yamashita, K., Blichert-Toft, J., Télouk, P., and Albarede, F. (2002). A short timescale for terrestrial planet formation from hf–w chronometry of meteorites. *Nature*, 418(6901):949–952.
- Zahnle, K., Arndt, N., Cockell, C., Halliday, A., Nisbet, E., Selsis, F., and Sleep, N. H. (2010). Emergence of a habitable planet. *Space Science Reviews*, 129:35–78.
- Zahnle, K. and Catling, D. C. (2017). The energetic prebiotic earth and the emergence of life. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 375(2091):20160353.
- Zahnle, K., Schaefer, L., and Fegley Jr, B. (2009). Atmospheric mineralogy: A new frontier for planetary science. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(48):20241–20246.