



**DETERMINACION DE CURVAS DE FUSION DE ALEACIONES FE-S  
A CONDICIONES DE INTERIORES PLANETARIOS MEDIANTE UN  
POTENCIAL DE MACHINE LEARNING**

Por:

**Andrés Felipe García Acuña**

Proyecto del trabajo de grado

Director:

**PhD. D Carlos Pinilla Castellanos**

Universidad Del Norte

Área de Ciencias Básicas, Departamento de

Física y Geociencias Barranquilla, Colombia

2024

**DETERMINACION DE LA CURVA DE  
FUSION DE ALEACIONES FE-S A  
CONDICIONES DE INTERIORES  
PLANEATRIOS MEDIANTE UN  
POTENCIAL DE MACHINE LEARNING**

**Andrés Felipe García Acuña**

Trabajo de investigación presentado como requisito parcial para  
optar al título de:

**Geólogo**

Director:

Carlos Pinilla Castellanos PhD

Línea de

investigación:

Ciencias de la Tierra

Universidad del Norte

Área de Ciencias Básicas, Departamento de

Física y Geociencias Barranquilla, Colombia

2024

## **AGRADECIMIENTOS**

Expreso mi agradecimiento al director Carlos Pinilla por su disposición y valioso apoyo brindado al proceso de elaboración del trabajo de grado, el cual contribuyó de manera significativa a mi desarrollo profesional.

Agradezco igualmente al equipo de trabajo de investigación, cuyas retroalimentaciones fueron fundamentales para mejorar la calidad del trabajo.

Finalmente, agradezco al grupo de profesores de geología y demás docentes, quienes, mediante sus enseñanzas y vocación, aportaron al desarrollo de mi identidad personal y profesional para alcanzar la meta final.

## RESUMEN

Las curvas de fusión se han estudiado experimental y teóricamente para comprender las propiedades de los materiales en condiciones extremas del interior terrestre, donde las temperaturas pueden alcanzar los 6000 K y las presiones superar los 330 GPa. Para estos estudios, se emplean técnicas experimentales, como la Celda de Yunque de Diamante (DAC), y métodos teóricos, como la teoría del funcional de la densidad (DFT). Sin embargo, los resultados suelen presentar discrepancias y su obtención implica un alto costo. Este estudio tiene como objetivo analizar las propiedades de determinados materiales mediante el uso de potenciales de aprendizaje automático (Machine Learning) aplicados a cálculos teóricos, utilizando dinámica molecular. Estos métodos emplean técnicas de mecánica cuántica basadas en la teoría del funcional de la densidad (DFT), con aproximaciones de gradiente generalizadas en los sistemas: hierro con azufre en distintas concentraciones ( $Fe_xS_y$ ), hierro en estructura Hexagonal Close-Packed o Empaquetamiento Compacto Hexagonal ( $FeHCP$ ) y hierro en estructura Body-Centered Cubic o Cúbica Centrada en el Cuerpo ( $FeBCC$ ). Mediante el uso de superceldas, este estudio busca conocer la ecuación de estado de estas tres estructuras puras, con el objetivo de compararlas con los datos existentes usados y validar la eficiencia del potencial, así como la curva de fusión eutéctica del  $FeHCP$ . Los resultados de la ecuación de estado de Birch-Murnaghan en tercer orden, concuerdan muy bien con los módulos de compresibilidad isentrópica en  $FeHCP$  y  $FeBCC$  de acuerdo con los modelos de Alfe (2002) y Sherman (1995) para condiciones de altas presiones. Para  $Fe_xS$ , se compara con el usado por Valencia (2022) y Chen (2007).

Finalmente, para las curvas de fusión  $FeHCP$  los modelos se asemejan con resultados usando técnicas Stillinger-Weber o SW (Alfe,2002) y las DAC (Morard, 2018). Siendo nuestro potencial un buen candidato para hacer análisis computacional de componentes hierro azufre teniendo valores cercanos a los anteriormente ya hechos con un menor costo computacional y tiempo.

Palabras Clave: DFT, dinámica molecular, curvas de fusión, Machine Learning, interiores planetarios, *FeHCP*, DAC, SW.

## ABSTRACT

Melting curves have been studied experimentally and theoretically to understand the properties of materials under extreme conditions in Earth's interior, where temperatures can reach up to 6000 K and pressures exceed 330 GPa.

Experimental techniques, such as the Diamond Anvil Cell (DAC), and theoretical methods, such as Density Functional Theory (DFT), are employed for these studies. However, the results often show discrepancies and are costly to obtain. This study aims to analyze the properties of certain materials using machine learning potentials applied to theoretical calculations through molecular dynamics. These methods employ quantum mechanics techniques based on Density Functional Theory (DFT) with generalized gradient approximations in the systems *Fe<sub>x</sub>S*, *FeHCP*, and *FeBCC*. By using supercells, this study seeks to figure out the equation of state for these three pure structures, with the goal of comparing them with existing data and confirming the potential's efficiency, as well as the eutectic melting curve of *FeHCP*. The results of the third-order Birch-Murnaghan equation of state align well with the isentropic compressibility modulus in *FeHCP* and *FeBCC* according to the models by Alfe (2002) and Sherman (1995) under high-pressure conditions. For *Fe<sub>x</sub>S*, comparisons are made with the model used by Valencia (2022) and Chen (2007).

Finally, for *FeHCP* melting curves, the models resemble results using SW techniques (Alfe, 2002) and DAC (Morard, 2018). Our potential proves to be a practical candidate for computational analysis of iron-sulfur components, showing values close to previously established data with reduced computational cost and time.

Keywords: DFT, molecular dynamics, melting curves, Machine Learning, planetary interiors, *FeHCP*, DAC, SW.

# Tabla de contenido

AGRADECIMIENTOS .....	3
RESUMEN .....	4
ABSTRACT .....	6
1. INTRODUCCION .....	10
2. JUSTIFICACION.....	11
3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	12
4. OBJETIVOS.....	14
4.1 Objetivo general .....	14
4.2 Objetivos específicos.....	14
5. METODOLOGIA .....	14
5.1 Modelación computacional.....	14
5.2 Potencial de Machine Learning.....	16
5.3 Ecuación de estado .....	17
5.4 Metodología de coexistencia para determinación de curva de melting .....	18
6. RESULTADOS.....	19
6.1 Ecuación de estado del hierro puro.....	19
6.2 Ecuación de estado <i>Fe3S</i> .....	22
6.3 Entalpía y estabilidad del <i>Fe3 S</i> a condición del núcleo terrestre .....	25
6.4 Curva de fusión <i>FeHCP</i> .....	27
6.5 Configuración de celda .....	27
6.6 Determinación de la curva de fusión para <i>FeHCP</i> .....	28
7. CONCLUSIONES.....	30
8. REFERENCIAS.....	32

## Lista de Figuras

Figura 1. Ajuste de la ecuación de estado de Birch-Murnaghan de 3 <sup>er</sup> orden para la presión de la estructura <i>FeBCC</i> pura con datos computacionales .....	20
Figura 2. Ajuste de la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de 3 <sup>er</sup> orden de la estructura <i>FeHCP</i> pura con datos experimentales. ....	21
Figura 3. Ajuste de la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de tercer orden para la presión en función del volumen de la estructura <i>Fe3 S</i> . ....	23
Figura 4. Grafica de entalpia vs presión del <i>FeHCP</i> , <i>Fe2S</i> y <i>Fe3S</i> respectivamente manteniendo la formula unidad. ....	25
Figura 5. Entalpia Vs Presión $Fe3S \rightarrow Fe2S + FeHCP$ . ....	26
Figura 6. Estructura coexistente líquido-sólido de <i>FeHCP</i> con supercelda de 8x8x16 con 2048 átomos. ....	27
Figura 7. Curva comparativa de mezcla del <i>FeHCP</i> .....	28

## Lista de tablas

Tabla 1. Parámetros estructurales para el ajuste del $FeHCP$ y $FeBCC$ a la ecuación de estado Birch–Murnaghan de tercer orden con 300K de nuestro estudio comparado con datos a 0K .....	<b>19</b>
Tabla 2. Parámetros estructurales para el ajuste del $Fe3S$ de la ecuación de estado Birch–Murnaghan de tercer orden a 300k con los datos comparados en Valencia (2022). Datos tomados de Valencia (2022) .....	<b>23</b>

## 1. INTRODUCCION

El núcleo terrestre está compuesto mayormente por metales ligeros y elementos como el hierro con aleaciones de níquel que constituyen entre el 80% y el 90% de la masa total del planeta, respaldado por evidencia de laboratorio y datos sísmicos (Allegre et al., 1995). Entre los posibles componentes ligeros se encuentran el Azufre (S), Oxígeno (O), Silicio (Si), Carbono (C) e Hidrógeno (H) debido a su alta afinidad con el Fe y su abundancia en el universo. Los estudios de Morard et al. (2014) proporcionan información importante para inferir perfiles de temperatura en el núcleo terrestre, que se sitúa entre los 4000 y 6000 Kelvin, estos sugieren una composición estratificada en el núcleo, como señala Li et al. (2007), el azufre emerge como el elemento ligero más prominente en el núcleo externo debido a su afinidad con el hierro y su moderada volatilidad, lo que contribuye a la deficiencia de densidad observada por el modelo PREM (Dziewonski et al., 1981); (Modelo de Referencia Preliminar de la Tierra), donde básicamente es un modelo que describe la estructura interna de la tierra basado en variaciones de densidad y velocidad sísmica en función de la profundidad.

El núcleo externo, es la capa ubicada entre el manto y el núcleo interno a profundidades de 2900 y 5150km respectivamente, ocupando el 15,6% del volumen de la tierra, con un rango de presiones en los límites de 130 a 330 GPa (Hirose, 2013). La estructura presenta una naturaleza líquida con densidades registradas de aproximadamente  $9,9 \text{ Mg/m}^3$  en el límite entre el núcleo y el manto (CMB) y alrededor de  $12,2 \text{ Mg/m}^3$  en el límite entre el núcleo interno y el núcleo externo (ICB), según Dziewonski et al. 1981). En la zona de transición entre el núcleo externo e interno, hay un salto de densidad de  $0,3 \text{ g/cm}^3$  y una discontinuidad en la velocidad de compresión de  $0,75 \text{ km}$ , según el modelo de Kennett (1995). Aquí se encuentra una mezcla líquida y sólida a una temperatura de fusión, con mayor concentración de azufre (S) en el líquido. Inicialmente se pensaría que el hierro (Fe)

puro sólido sería el principal candidato para explicar esta anomalía, sin embargo, esta densidad presente en el núcleo interno es 5% mayor (Poirier 1994; Li et al.,2001), y en el externo establecen una concentración máxima de 6-8wt%S (Mori et al.,2017). Otros autores como Tateno (2018) hablan de una concentración entre los 9-14wt%S, y los datos propuestos por estudios de meteoritos son mayores (16wt%S) según Dewaele et al (2006), teniendo en cuenta que los meteoritos son fragmentos de las capas más internas de los planetas primitivos.

Por estas inconsistencias con respecto a la composición de los núcleos, se propone estudiar estas curvas de fusión en sistemas de aleaciones Fe-S en el núcleo terrestre mediante métodos computacionales haciendo uso de un potencial de Machine Learning que simulen condiciones para acercarse un poco más al entendimiento de las propiedades de los distintos sistemas que pueden albergar y establecer una mayor precisión de la composición del núcleo externo.

## **2. JUSTIFICACION**

Como la determinación sobre la composición química y las propiedades físicas del núcleo de la tierra son imposibles de realizar mediante técnicas experimentales se han propuesto métodos indirectos mediante la observación sísmológica del interior terrestre por tomografías globales. Estas técnicas han propuesto presencias de estructuras hexagonal compacta (HCP) y cúbica centrada en el cuerpo (BCC) de las aleaciones sólidas de Fe y S que componen el núcleo interno (Deuss. 2014).

Para la obtención en las aleaciones Fe-S líquidas de la composición del núcleo, se ha tenido más complicaciones, debido a que estas no concuerdan con el modelo PREM y ak115 de Kennett (1995) (Morard et al., 2014; Huang et al. 2016; Fei et al., 2000; Li et al., 2001). Una solución para entender mejor los resultados y tener mejores aproximaciones, es mediante técnicas computacionales de dinámica molecular, basadas en el principio de la teoría del funcional de la densidad (DFT) que busca calcular la densidad electrónica de un sistema según información de la energía total y sus propiedades asociadas; la

dinámica molecular de primeros principios (AIMD) que modela al átomo como un cuerpo newtoniano en una red molecular no parametrizada, con el fin de simular condiciones de temperatura entre 4000K y 6000K y de presión entre 130 y 330 GPa del núcleo en interiores planetarios. Utilizar un potencial de Machine Learning que puede calcular las interacciones de átomos de Fe y S, permite modelar estas estructuras potenciales a existir y coexistir en fase sólida-líquida, obteniendo datos que modelen curvas de fusión para diferentes estructuras de Fe y Fe-S en coexistencia.

### **3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

Al ser el azufre un candidato como elemento principal del núcleo externo de la tierra, se tienen varios problemas al determinar cómo es su comportamiento en condiciones determinadas de temperatura y presión, dependiendo de estas condiciones su concentración influye tanto en los resultados de densidad como en los modelos PREM (Umemot,2014), cuyas velocidades de  $V_p$  (ondas primarias) registradas no coinciden con los modelos de concentración de S simulados.

Además, que el margen de error en los cálculos experimentales es alto, incluso en los primeros 20 GPa (Fei 1997,2001,2001; Morard 2007, Bueno and Walker 2011; Usselman,1975), Una de las causas es debido a los errores técnicos cuando se replican estas

condiciones que generan valores experimentales muy dispersos que dependían mucho de la forma como determinaban la temperatura. (Usselman, 1975).

Es por ello que además de estimar la concentración de azufre en condiciones del núcleo dependiendo de su capacidad de disolución; conocer las curvas de mezcla nos permitirá evaluar esta fusión de la cual en la actualidad, se tienen complicaciones para replicar estas condiciones y saltos de densidad en los modelos PREM, con el fin de acercarnos a un mayor entendimiento de la interacción de un sólido-líquido en la zona de estratificación interna-Externa del núcleo terrestre haciendo uso de un potencial de Machine Learning el cual emplea un sistema de regresión de Kernel creado para calcular potenciales interatómicos de átomos de Fe y S; haciendo uso de una base de datos previamente calculada por la teoría funcional de la densidad que suele ser una técnica computacional muy costosa y lenta (Bartók, 2013). Finalmente podríamos incidir en lo que ocurre en esos diagramas de fase haciendo uso de un equipo computacional menos potente y obteniendo los cálculos más rápidos, mediante el método de coexistencia de interacciones Fe-S – Fe eutécticas a condiciones del núcleo externo, respondiendo:

¿Cuáles son los límites de estabilidad de las aleaciones de Fe-S en el núcleo externo?

## 4. OBJETIVOS

### 4.1 Objetivo general

Estudiar aleaciones de sistemas Fe-S y determinar curvas de fusión a condiciones del núcleo terrestre usando métodos computacionales.

### 4.2 Objetivos específicos

Determinar las propiedades estructurales de sistemas líquidos y sólidos de Fe-S en condiciones del núcleo externo terrestre.

Determinar curvas de fusión para sistemas de Fe en condiciones del núcleo externo terrestre.

## 5. METODOLOGIA

### 5.1 Modelación computacional

Los cálculos computacionales se realizan mediante el método de simulación de dinámica molecular (MD) utilizando el programa LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively)<sup>1</sup>. La dinámica molecular es una técnica de simulación que permite calcular propiedades de equilibrio y transporte de un compuesto de partículas, basadas en la simulación del movimiento de partículas (átomos o moléculas) bajo la influencia de fuerzas calculadas a partir de un potencial de interacción. Los componentes fundamentales de la DM son:

Para un conjunto de **N** partículas, la segunda ley de Newton se aplica a cada partícula **i**:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \quad (1)$$

Donde:  $m_i$  es la masa de la partícula  $i$ ,  $r_i$  es la posición,  $F_i$  es la fuerza neta actuando sobre la partícula.

El integrador usado para las condiciones T-P, es el de *Nose-Hoover* en un ensamble *NPT* (Número de átomos, Presión, y Temperatura constantes) La temperatura para los metales en LAMMPS se maneja en Kelvin y la presión en kbar, buscando una presión isotrópica (la misma presión en todas las direcciones).

Para simular un sistema infinito o evitar efectos de borde en un sistema finito, LAMMPS utiliza condiciones de borde periódicas (PBC). Esto significa que cuando una partícula sale de la caja de simulación, por un lado, reaparece en el lado opuesto con la misma velocidad.

Estas ecuaciones incorporan fuerzas ficticias para ajustar la escala de las posiciones y velocidades de las partículas en el sistema, de manera que el volumen fluctúe y la presión y temperatura objetivo se mantengan. En el ensamble *NPT*, las posiciones y velocidades de las partículas se actualizan de acuerdo con las siguientes ecuaciones de movimiento, modificadas por el termostato y el baróstato de *Nose-Hoover*:

Para las velocidades:

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{F_I}{m_i} - \zeta v_i \quad (2)$$

donde  $\zeta$  es la variable de fricción que ajusta la temperatura.

Para las posiciones  $r_i$ :

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \quad (3)$$

## 5.2 Potencial de Machine Learning

Para el cálculo de fuerzas, usamos el Potencial de Aproximación Gaussiana (GAP) (Bartok et al., 2010), que es esencialmente un método de regresión de Kernel (Kung, 2014). Creado para calcular potenciales interatómicos no paramétricos, que han sido exitosos a la hora de abordar el modelado de materiales como el hierro (Dragoni et al., 2018)) y los líquidos

moleculares (como el agua (Bartók et al., 2013a)).

Suponiendo que la superficie de energía potencial de Born-Oppenheimer de un conjunto de átomos es una función de las coordenadas atómicas, la energía total es la suma de todas las interacciones atómicas.

$$E = \sum_i \epsilon(q_i) \quad (4)$$

Donde la energía atómica local de corto alcance  $\epsilon$  depende explícitamente de las posiciones de los átomos dentro de una esfera de radio  $r_i$  centrada en el átomo y  $q_i$  es un vector que representa el entorno del átomo.

Los procesos de regresión Gaussianos modelan  $\epsilon$ :

$$\epsilon(q) = \sum_s \alpha_s K(q_s, q) = k(q)^T \alpha \quad (5)$$

Teniendo dos átomos, la función de Kernel  $K(q_i, q_j)$ , se espera que la covarianza de las energías atómicas locales de  $q_i$  y  $q_j$ , se interpretan como una medida de átomos similares de dos ambientes locales atómicos. Se elige el núcleo de Smooth Suave de Posiciones Atómicas (SOAP) (Bartók et al., 2013b) para suavizarla.

$$K(q_s, q) = \sigma_u^2 |\hat{q}_i \cdot \hat{q}_i|^\xi \quad (6)$$

Donde es el espectro de potencia rotacional de la densidad de vecinos atómicos, que es una función suave y regular, invariante a rotaciones y permutaciones de átomos similares. La ventaja de la representación es que se requieren muy pocos parámetros empíricos, entre ellos la distancia de corte, el smooth de las posiciones atómicas y un exponente  $\xi$  al que se eleva el núcleo lineal SOAP, controlando el orden del cuerpo del campo de fuerza resultante, de modo que exponentes más altos resultan en términos de orden de muchos cuerpos más altos. Todos los hiperparámetros, se explican en los datos de la tabla 1 de Zhang (2020) y a

mayor detalle el potencial en Bartók (2013) y Ceriotti et al (2018).

Durante la simulación, LAMMPS calcula una variedad de propiedades físicas, como la energía potencial total, la energía cinética, la temperatura, la presión. Estas propiedades se calculan promediando sobre todas las partículas y se utilizan para calcular la dinámica de todo el sistema.

## 5.2 Ecuación de estado

La ecuación de estado de Birch-Murnaghan de tercer orden es especialmente adecuada para materiales con estructuras cristalinas complejas, como el  $Fe_{HCP}$ , ya que proporciona una representación precisa de cómo varían la presión y el volumen a lo largo de un rango de presiones, las cuales tendrán que llegar a condiciones del núcleo terrestre 130 -360 GPa. Además de que esta es una estructura muy conocida y estudiada, los datos proporcionados aportarán a darle validez al potencial gaussiano utilizado.

$$P(V) = \frac{3K_0}{2} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (K'_0 - 4) \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\} \quad (7)$$

Donde  $P(V)$  es la presión en función del volumen,  $K_0$  es el módulo de compresibilidad que representa la resistencia a la compresión del material y  $K'_0$  la derivada del módulo de compresibilidad respecto a la presión la cual me representa como cambia la rigidez del material a medida que se aumenta a condiciones extremas.

### 5.1 Metodología de coexistencia para determinación de curva de Melting

Para poder realizar las curvas de fusión es necesario aplicar el método de coexistencia de fases sólido-líquida (1994) y Schwegler et al (2008) se utiliza para determinar el equilibrio entre diferentes fases de un material bajo condiciones de presión.

Este método se basa en el principio de que, en equilibrio, las diferentes fases del material

poseen la misma energía libre. Por lo tanto, se puede utilizar para ajustar y encontrar el volumen de equilibrio y los parámetros asociados a partir de datos experimentales.

Primero se recopilan experimentalmente los datos de la presión y temperatura para las estructuras mediante un volumen constante, una mitad se funde a temperaturas muy altas para romper la estructura y la otra mitad se mantiene fija para la parte sólida. Luego de ello se utiliza la estructura, para ajustar parámetros de condiciones de temperatura y presión específicas mediante la minimización de la diferencia entre energías libres calculadas y observadas, para asumir que las dos fases estén en equilibrio. Finalmente, se ejecuta el cálculo con las condiciones NPT; luego se guarda el archivo donde se hace el uso de herramientas gráficas para observar si la estructura se convirtió en un sólido o un líquido. Para el análisis, se seleccionan varios puntos a una misma presión, pero con diferentes temperaturas. De estos puntos, se determina un punto medio que corresponde al punto de coexistencia entre las fases líquida y sólida. Este punto refleja las condiciones bajo las cuales ambas fases pueden coexistir en equilibrio. Al graficar los puntos medios obtenidos para distintas presiones, se genera una curva de mezcla que describe este comportamiento a lo largo de las condiciones de temperatura y presión. Esta curva se compara con los datos bibliográficos reportados por otros autores. Es importante destacar que este enfoque, basado en un potencial de Machine Learning, representa una novedad dentro del campo de estudio.

## 6. RESULTADOS

### 6.1 Ecuación de estado del hierro puro

Para relacionar la presión de las fases de *FeHCP* y *FeBCC* en función de su volumen, en la ecuación 1 se realiza el ajuste a la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de tercer orden para una celda de unidad de 1024 átomos para describir el comportamiento de las estructuras de hierro del tipo hexagonal compacta (HCP) y cúbica centrada en el cuerpo (BCC).

Tabla 1. Parámetros estructurales para el ajuste del  $FeHCP$  y  $FeBCC$  a la ecuación de estado Birch–Murnaghan de tercer orden con 300K de nuestro estudio comparado con datos a 0K.

<b>Fase</b>	<b>Autor</b>	<b><math>k_0</math>(GPa)</b>	<b><math>k_0'</math></b>	<b><math>V_0</math>(Å<sup>3</sup> /atom)</b>	<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>Método</b>
	<i>Alfé</i>	178	4,80	11,51	8,05	DFT
<b>BCC</b>	<i>Sherman</i>	177	4,67	11,6	7,95	DFT
	<i>Jepchoath</i>	172	5	11,78	7,86	E
	<b>Realizado</b>	<b>171</b>	<b>4,14</b>	<b>11,45</b>	<b>8,09</b>	<b>Cálculo</b>
	<i>Alfé</i>	287	4,5	10,25	9,04	DFT
<b>HCP</b>	<i>Sherman</i>	260	4,53	10,55	7.95	DFT
	<i>Mao</i>	164,8	5,33	6,73	NA	E
	<b>Realizado</b>	<b>127,95</b>	<b>4,46</b>	<b>11,15</b>	<b>9,03</b>	<b>Cálculo</b>

Los datos obtenidos mediante la herramienta EOSfit muestran que el hierro BCC tiene un módulo de compresibilidad de 171 GPa y una derivada ( $K_p$ ) de 4.14 a 300 K. En contraste, la fase HCP presenta un módulo de 127.95 GPa, una derivada ( $K_p$ ) de 4.46 y una densidad de 1 g/cm<sup>3</sup>, lo que sugiere que HCP es más compacto a pesar de tener el mismo número de átomos (1024). La Tabla 1 resume los parámetros estructurales de ambas fases ajustados a la BM-EOS y las compara con el de otros estudios. Estos resultados indican que BCC muestra una mayor resistencia a la deformación. Sin embargo, es importante señalar que nuestro modelo mecánico no considera las propiedades magnéticas en el rango de 15 a 40 GPa (Y. Wang, 1997), lo que podría resultar en imprecisiones en comparación con estudios más completos que utilizan DFT (Sherman, 1998) y experimentales (Mao, 1990).

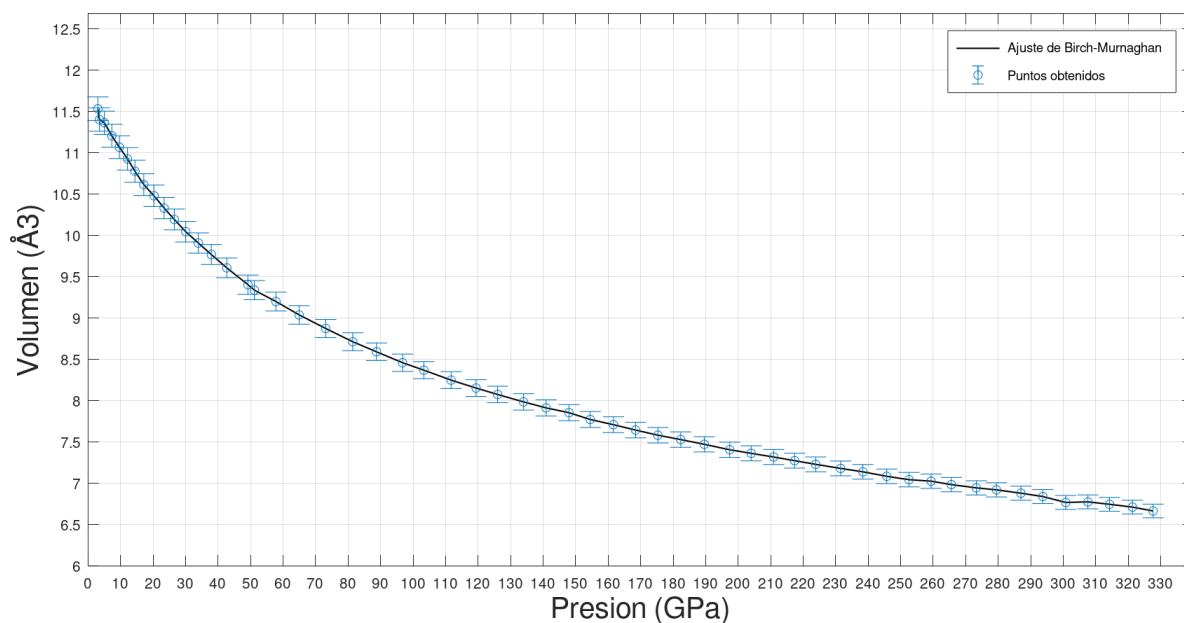


Figura 1. Ajuste de la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de 3<sup>er</sup> orden para la presión de la estructura  $Fe_{BCC}$  pura con datos experimentales

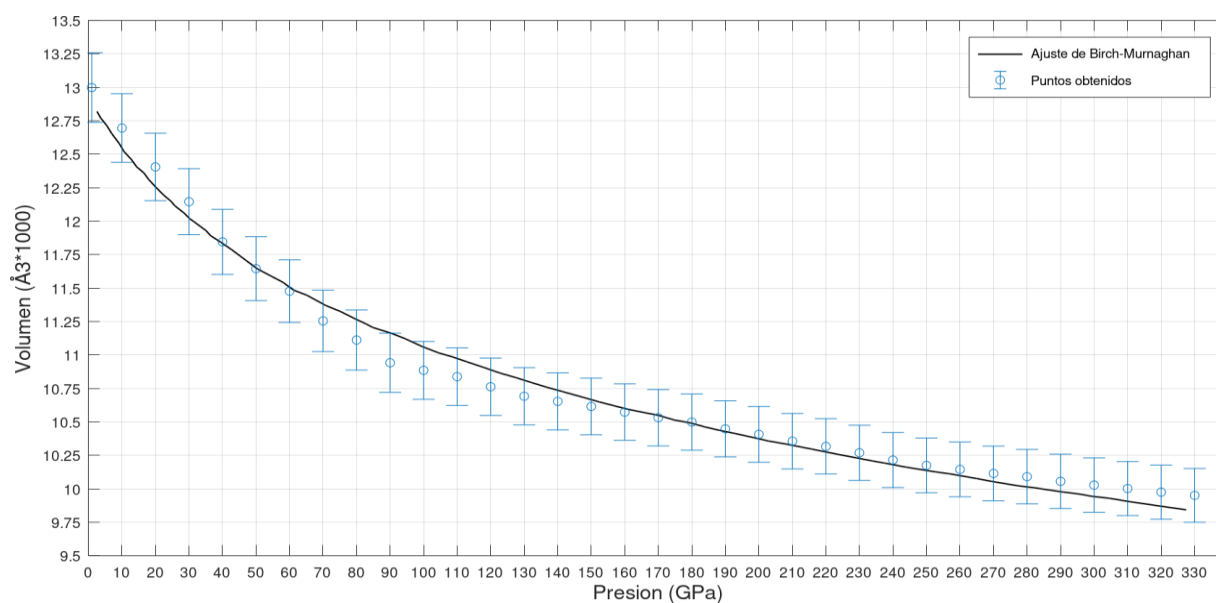


Figura 2. Ajuste de la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de 3<sup>er</sup> orden de la estructura  $Fe_{HCP}$  pura con datos experimentales.

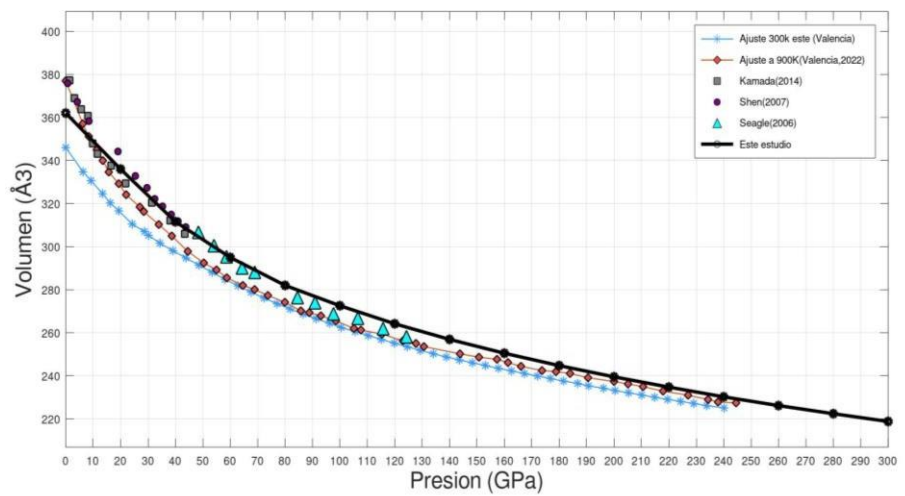
Para  $Fe_{BCC}$ , los resultados reflejan una diferencia promedio del 5% en el módulo de compresibilidad frente a los valores obtenidos por Alfé (2002) y Sherman (1995) (Tabla 1),

indicando una buena concordancia entre nuestros métodos DFT y los datos experimentales.

En el caso de *FeHCP*, los valores muestran una notable similitud con los módulos de compresibilidad reportados por Alfé (1998) y Mao (1990), con un margen de error del 17.4% respecto a Mao y solo del 1% respecto a Alfé. Estas variaciones, junto con el aumento de temperatura a 300 K, sugieren que la expansión térmica influye en el volumen y densidad, especialmente en la fase HCP ya que el volumen inicial es un 9% mayor. Además, la ecuación de estado aplicada a *Fe<sub>x</sub>S* revela que el potencial de ML implementado ofrece un desempeño comparable a los modelos tradicionales, permitiendo simulaciones más eficientes y de menor costo computacional, demostrando así la efectividad de los métodos DFT para predecir propiedades mecánicas en condiciones de alta presión, pero para la temperatura se habría que considerar mejorar el ajuste ya que este hace cambios significativos en los datos de HCP.

Además, se tomaron los datos del volumen mediante el cálculo de la desviación y el error estándar de la media para conocer el porcentaje de error del espacio de los átomos que ocupa cada átomo de Fe, el cual dio un 8% debido a errores de los cálculos del volumen (Montgomery,2014).

## 6.2 Ecuación de estado $Fe_3S$



*Figura 3. Ajuste de la ecuación de estado de Birch – Murnaghan de tercer orden para la presión en función del volumen de la estructura  $Fe_3S$ .*

Los datos obtenidos mediante la herramienta EOSfit muestran que el hierro BCC tiene un módulo de compresibilidad de 171 GPa y una derivada ( $K_p$ ) de 4.14 a 300 K. En contraste, la fase HCP presenta un módulo de 127.95 GPa, una derivada ( $K_p$ ) de 4.46 y una densidad de  $1 \text{ g/cm}^3$ , lo que sugiere que HCP es más compacto a pesar de tener el mismo número de átomos (1024). La Tabla 1 resume los parámetros estructurales de ambas fases ajustados a la BM-EOS y las compara con el de otros estudios. Estos resultados indican que BCC muestra una mayor resistencia a la deformación. Sin embargo, es importante señalar que nuestro modelo mecánico no considera las propiedades magnéticas en el rango de 15 a 40 GPa (Y. Wang, 1997), lo que podría resultar en imprecisiones en comparación con estudios más completos que utilizan DFT (Sherman, 1998) y experimentales (Mao, 1990)

Tabla 2. Parámetros estructurales para el ajuste del  $Fe_3S$  de la ecuación de estado Birch–Murnaghan de tercer orden a 300k con los datos comparados en Valencia (2022). Datos tomados de Valencia (2022).

<b>Fase</b>	<b>Autor</b>	<b><math>k_0</math>(GPa)</b>	<b><math>k_0'</math></b>	<b><math>V_0</math>(Å<sup>3</sup> /atom)</b>	<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>Método</b>
	Alfé	178	4,80	11,51	8,05	DFT
<b>BCC</b>	Sherman	177	4,67	11,6	7,95	DFT
	Jepchoath	172	5	11,78	7,86	E
	<b>Realizado</b>	<b>171</b>	<b>4,14</b>	<b>11,45</b>	<b>8,09</b>	<b>Cálculo</b>
	Alfé	287	4,5	10,25	9,04	DFT
<b>HCP</b>	Sherman	260	4,53	10,55	7.95	DFT
	Mao	164,8	5,33	6,73	NA	E
	<b>Realizado</b>	<b>127,95</b>	<b>4,46</b>	<b>11,15</b>	<b>9,03</b>	<b>Cálculo</b>

Los datos obtenidos mediante la herramienta EOSfit muestran que el hierro BCC tiene un módulo de compresibilidad de 171 GPa y una derivada ( $K_p$ ) de 4.14 a 300 K. En contraste, la fase HCP presenta un módulo de 127.95 GPa, una derivada ( $K_p$ ) de 4.46 y una densidad de 1 g/cm<sup>3</sup>, lo que sugiere que HCP es más compacto a pesar de tener el mismo número de átomos (1024). La Tabla 1 resume los parámetros estructurales de ambas fases ajustados a la BM-EOS y las compara con el de otros estudios. Estos resultados indican que BCC muestra una mayor resistencia a la deformación. Sin embargo, es importante señalar que nuestro modelo mecánico no considera las propiedades magnéticas en el rango de 15 a 40 GPa (Y. Wang, 1997), lo que podría resultar en imprecisiones en comparación con estudios más completos que utilizan DFT (Sherman, 1998) y experimentales (Mao, 1990).

Al contrastar estos resultados con el estudio de Valencia (2022), que reporta un volumen

inicial, módulo de compresibilidad y derivada con valores de  $339.0 \text{ \AA}^3$ ,  $175 \text{ GPa}$ , y  $5.1$ , respectivamente, se observa una discrepancia de aproximadamente  $6.8 \%$  en el volumen inicial pese a estar a la misma temperatura ( $300\text{K}$ ) y de  $2.2 \%$  en el módulo de compresibilidad, mientras que la derivada presenta una dispersión del  $18.6 \%$ . Esto sugiere una diferencia en las predicciones de respuesta bajo presiones más altas y una dependencia significativa en el método de DFT con el del método en estudio, por lo que el modelo tiene datos bastante ajustados, pero los detalles con respecto a cómo se sacan los módulos de presión y el volumen inicial pueden ser debatidos.

Por otra parte, los valores de  $V_0 = 377.0 \text{ \AA}^3$ ,  $K_0 = 170 \text{ GPa}$  y  $K_0' = 2.6$  reportados por Fei et al. (2000), obtenidos experimentalmente, revelan un menor módulo de compresibilidad y una derivada inferior en comparación con los valores calculados en este estudio. Sin embargo, la similitud en el volumen inicial con apenas un  $4\%$  de diferencia refuerza la validez del modelo GAP utilizado. Esta tendencia general concuerda también con los estudios de Seagle et al. (2006) y Chen et al. (2007), cuyas variaciones en los módulos de compresibilidad y derivadas se mantienen en márgenes de  $8\text{-}12 \%$  respectivamente.

En el caso del Fe HCP ( $K_0 = 128 \text{ GPa}$ ,  $K_0' = 4.46\text{K}$ ), el material es menos resistente inicialmente pero su compresibilidad aumenta más rápidamente con la presión, lo que lo hace relevante en el núcleo interno de la Tierra. Por otro lado, el Fe BCC ( $K_0 = 173 \text{ GPa}$ ,  $K_0' = 4.15\text{K}$ ) es más resistente a la compresión inicial, pero su comportamiento cambia menos con la presión, siendo más representativo de condiciones externas del núcleo.

### 6.3 Entalpía y estabilidad del $Fe_3 S$ a condición del núcleo terrestre

En esta sección se realiza un cálculo de los datos obtenidos para elaborar un gráfico que represente la entalpía en función de los parámetros de presión, volumen y energía total del sistema, teniendo en cuenta la fórmula unidad,  $Fe_3 S = Fe_2 S + Fe_{HCP}$  (Valencia, 2022).

La figura 4 nos permite observar cómo los compuestos liberan energía a medida que aumenta la presión, lo que es consistente con la termodinámica de sistemas en condiciones extremas (Jackson, 2013).

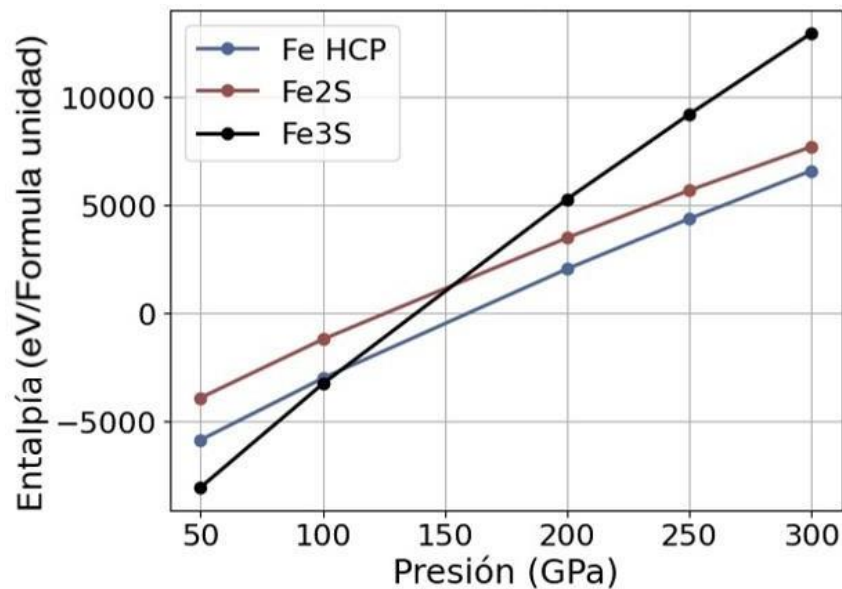


Figura 4. Grafica de entalpia vs presión de  $Fe_{HCP}$ ,  $Fe_2S$  y  $Fe_3S$  respectivamente manteniendo la formula unidad

Se observó cómo las propiedades se correlacionan con la energía liberada. Asimismo, el módulo de compresibilidad es más alto para  $Fe_3S$ , alcanzando 179 GPa, lo que significa que es más resistente a cambios de volumen bajo presión. En comparación con  $Fe_{HCP}$ , que tiene un módulo de 129 GPa, es más compacto y también la derivada del módulo de compresibilidad para  $Fe_{HCP}$ , es de 4.46, superando el 4.14 de  $Fe_3S$ , lo que indica que es más flexible ante cambios de presión.

En la figura 4 observamos el comportamiento de la figura de la gráfica de las entalpias para  $Fe_{HCP}$ ,  $Fe_2S$ ,  $Fe_3S$  donde a partir de los 171 GPa  $Fe_{HCP}$  deja de ser estable termodinámicamente y este empieza a liberar energía, en cambio para los demás compuestos de  $Fe_xS$  esta fase comienza a liberarse desde antes (110- 130GPa) lo que coincide con los

límites del núcleo externo.

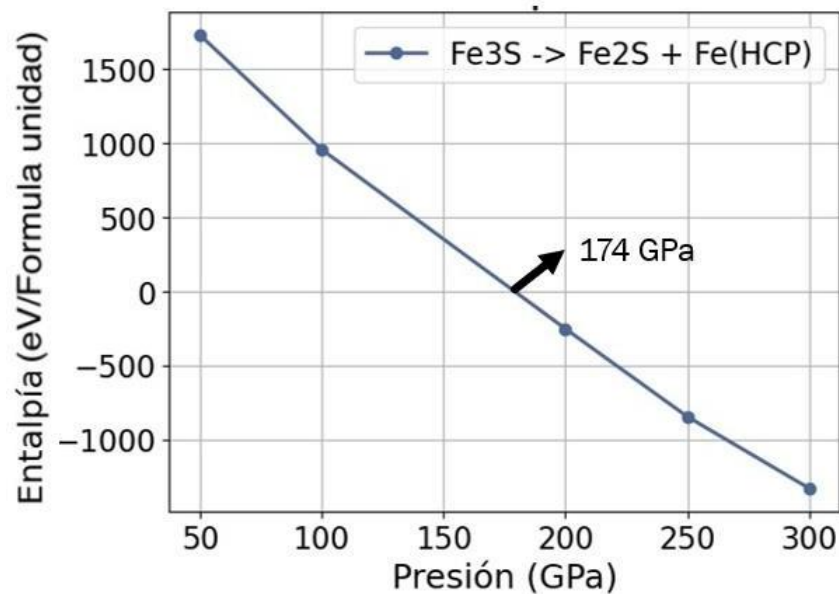


Figura 5. Entalpía Vs Presión  $Fe_3S \rightarrow Fe_2S + Fe_{HCP}$

En este cálculo se hace la relación de la ruptura de la estructura  $Fe_3S$  en dos componentes ( $Fe_2S + Fe_{HCP}$ ) los cuales según Valencia (2022) muestran que el sistema se empieza a hacer inestable y a partir de los 250 GPa este se empieza a desestabilizar liberando energía, sin embargo de acuerdo a nuestro modelo este punto empieza en los 174 GPa lo cual corresponde a un punto posterior al inicio del núcleo externo 130 GPa (Hirose, 2014) el cual corresponde a la liberación de energía resumida en la convección térmica del material líquido del núcleo externo, impulsada por la transferencia de calor desde el núcleo interno sólido, en estos puntos de presión se presentan corrientes de convección que, a su vez, inducen la formación del campo magnético terrestre mediante el mecanismo de dinamo. Esta liberación de energía térmica es responsable del campo magnético, que protege la atmósfera de la radiación solar. La energía liberada en el núcleo externo impulsa la dinámica interna del planeta, desempeñando un papel crucial en la estabilidad térmica y geodinámica de la Tierra a largo plazo. (Labrosse et al., 2001; Stevenson, 2003; Buffet, 2000).

## 6.4 Curva de fusión $Fe_{HCP}$

### 6.4.1 Configuración de Supercelda

Según Hirose (2013), en condiciones iniciales de 330GPa – 6000k y 130GPa - 4000 K, la configuración de coexistencia sólido – líquido se realizó mediante un cálculo NVT de los primeros extremos en condiciones de los límites del núcleo externo. Inicialmente la mitad de la primera estructura se mantuvo fija para mantener el ensamble sólido y la otra mitad activa para romper la estructura, ya en el último paso se tomó las coordenadas de los 2048 átomos la cual sería la figura inicial para determinar la curva de fusión.

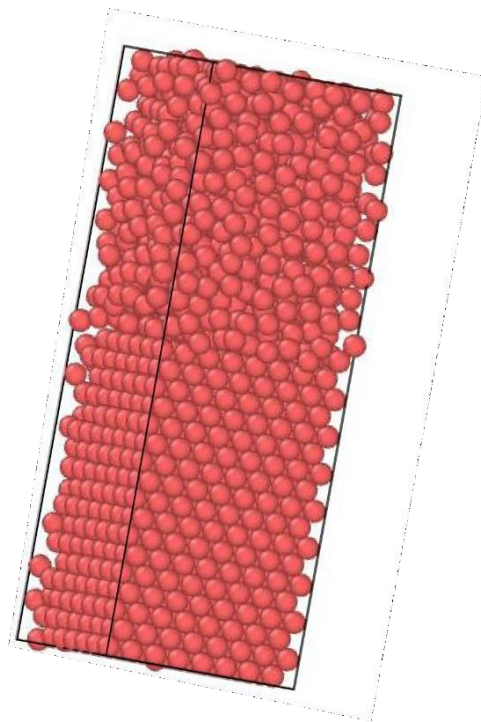


Figura 6. Estructura coexistente líquido-sólido de  $Fe_{HCP}$  con supercelda de 8x8x16 con 2048 átomos.

### 6.4.2 Determinación de la curva de fusión para $Fe_{HCP}$

La curva de fusión del  $Fe_{HCP}$  puro es el producto de distintos estudios que usan técnicas experimentales y teóricas. Una de ellas es la técnica DAC, la cual usa presiones inferiores a 200 GPa para obtener un determinado número con una

desviación por lo general grande e interpolar los puntos para aproximarse a lo esperado (Ahrens et al. 2002), esto suele tener un rango de incertidumbre muy alto que oscila entre los 1500K de diferencia.

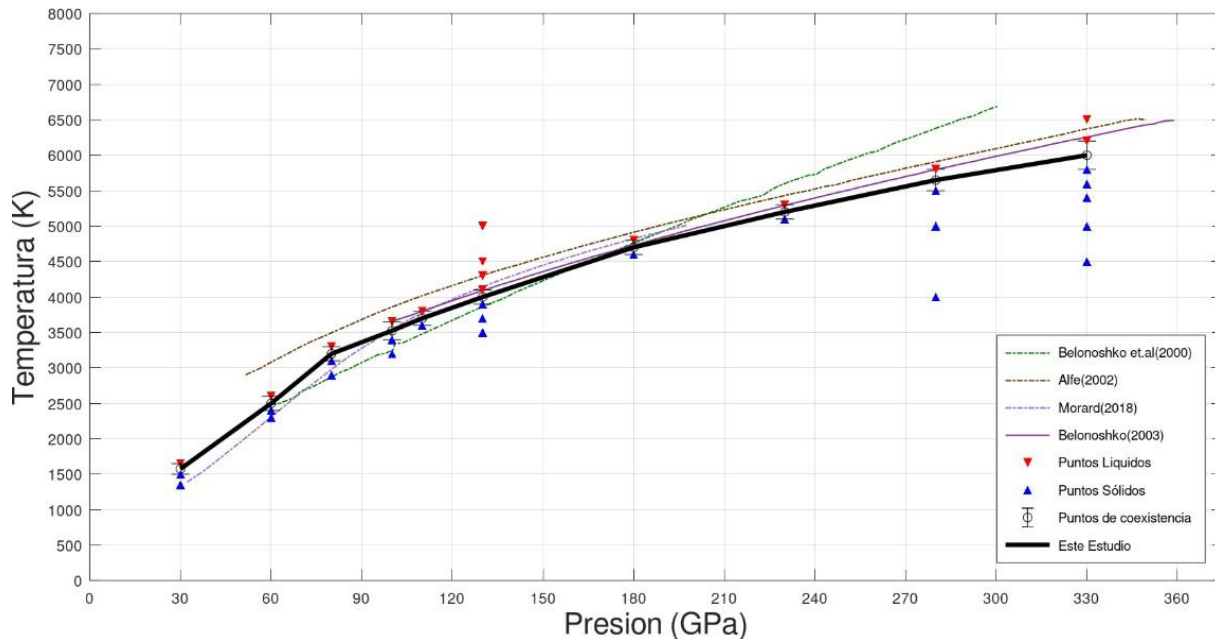


Figura 7. Curva comparativa de mezcla del  $Fe_{HCP}$

Curva de mezcla del  $Fe_{HCP}$ , obtenida mediante cálculos de dinámica molecular con el uso del método de Coexistencia comparada con los resultados de Belonoshko (2003), con un trabajo de Alfe (2002) que tiene en cuenta la entropía electrónica y un resultado experimental de calentamiento de yunques por rayos X de Morard (2018).

Los estudios de Alfe (2002; 2009) han mostrado resultados similares en los rangos de temperatura y presión que hemos analizado a partir de presiones altas. Sin embargo, los resultados obtenidos por Belonoshko (2000; 2003) presentan discrepancias significativas, con variaciones que pueden alcanzar hasta 1500 K. Esta diferencia se debe a que el enfoque de simulación utilizado por Belonoshko no considera la entropía electrónica. La entropía electrónica es un aspecto importante en el estudio de sistemas a altas temperaturas, ya que influye en la

energía y el comportamiento de los átomos en el material.

Por el contrario, los resultados de Alfe (2002) no solo están por encima de los estimados obtenidos con técnicas DAC (celdas de anillo de diamante), sino que también están relacionados con métodos de potencial empírico conocidos como SW (Stillinger-Weber). Estos métodos tienen en cuenta no solo la energía de enlace covalente entre átomos, sino también las interacciones a corto y largo alcance entre los átomos de hierro (Fe) y azufre (S). Esto permite que los resultados de Alfe se ajusten adecuadamente a los parámetros del enfoque de energía libre, que es una forma de evaluar la estabilidad y el equilibrio en sistemas materiales.

En cuanto a los datos de Morard (2018), la curva de Melting estos se obtuvieron a través de una técnica experimental que utiliza un yunque de diamante calentado por láser para medir la absorción de rayos X de energía dispersiva. Esta técnica es propensa a problemas de contaminación por carbono lo que pudo mostrar estos puntos de fusión más bajos en los primeros 100 GPa ya que la presencia de carbono podría reducir la temperatura de fusión del sistema, debido a que los carburos de hierro tienen puntos de fusión más bajos que el hierro puro. (Zhang, 1994).

Por otro lado, nuestros hallazgos difieren en 500 K de los resultados de Alfe (2002). Esta discrepancia puede atribuirse a la cantidad limitada de puntos analizados en nuestra investigación. En nuestro estudio, validamos los puntos de fusión a presiones específicas de 130 GPa y 330 GPa (como se muestra en la Figura 7). Para lograr esto, realizamos una interpolación de puntos, que consiste en tomar mediciones en varios puntos de presión y temperatura para establecer dos mediciones por fase en los rangos intermedios de 170, 200, 250 y 300 GPa.

Con base en nuestras observaciones, recomendamos que en futuros trabajos se aumente el

número de puntos muestreados. Esto permitirá una validación más precisa de los resultados. Además, sería beneficioso realizar cálculos adicionales que ayuden a mejorar la estimación de los rangos de error, es decir, la incertidumbre asociada a las mediciones, para poder tener conclusiones más confiables.

## 7. CONCLUSIONES

Este trabajo empleó métodos de modelado computacional utilizando un potencial gaussiano para simular las interacciones de Fe y S, con el fin de estudiar las propiedades estructurales del hierro en sus fases HCP y BCC. Los resultados muestran que nuestro potencial replica con buena precisión los cálculos de DFT realizados por Sherman y Alfe, validando así su efectividad en el estudio de estas estructuras bien documentadas.

Al comparar nuestras propiedades estructurales con los resultados de Valencia (2022), observamos similitudes en las características de  $Fe_3S$  y  $Fe_2S$ , lo que sugiere que el potencial de Machine Learning puede ser utilizado en futuros estudios.

Nuestro enfoque incluyó la comparación con trabajos de otros autores, analizando las diferencias en las técnicas empleadas, y utilizando un potencial empírico que integra la energía libre electrónica en condiciones del núcleo externo terrestre.

También se llevó a cabo un ensamble de átomos más grande, lo que garantiza resultados más precisos en comparación con estudios anteriores.

Se identificó la estabilidad de las estructuras BCC y HCP a una temperatura constante de 300 K, donde los módulos de compresibilidad del hierro HCP coincidieron con los resultados teóricos,

mientras que el BCC mostró discrepancias según lo previsto por Hirose (2013). El módulo de compresibilidad isentrópica del Fe BCC presentó un margen de error del 8% en comparación con otros modelos que utilizaron celdas significativamente más pequeñas. Esto sugiere que nuestro potencial empírico replica correctamente la red de átomos, evitando fallas estructurales. Aunque el HCP mostró variaciones en el módulo de compresibilidad debido a su inestabilidad a bajas presiones, se observó que el BCC podría ser más estable en condiciones de interiores planetarios. Este hallazgo contradice la percepción de que el HCP es el más estable bajo condiciones elevadas, como se argumenta en la investigación de Hirose (2013). Además, se exploró la incorporación de S como estabilizador en la estructura de Fe, abriendo la puerta a futuros estudios sobre los sistemas Fe-S.

La entalpía del sistema  $Fe_3S$ , en condiciones de interior planetario, muestra una secuencia de transiciones estructurales que revelan su estabilidad relativa y respuesta energética ante aumentos de presión. A presiones bajas (20-60GPa), se libera energía indicando la formación de enlaces más estables (Seagle, 2006); sin embargo, a medida que la presión incrementa, la entalpía cambia su tendencia, consumiendo energía para mantener la estructura (Jackson, 2013), alcanzando un punto de estabilidad límite alrededor de 260 GPa (Tateno et al. 2019; Thompson et al. 2020). Posteriormente, una pérdida abrupta de entalpía sugiere un cambio de fase cerca de los 174 GPa. Este comportamiento sugiere que  $Fe_3S$  experimenta transiciones de fase en función de la presión, mostrando adaptabilidad en condiciones de alta presión que podrían ser relevantes para entender las características del interior planetario y confirmar la descomposición del  $Fe_3S$  en  $Fe_2S$  y  $Fe_{HCP}$ , según Tateno (2019).

En relación con la curva de fusión del  $Fe_{HCP}$ , se aplicó el método de coexistencia de fases considerando los efectos del tamaño de celda, tomando como referencia las curvas de mezcla establecidas y analizando los puntos límite del núcleo externo a 130 GPa y 4000 K, así como a

330 GPa y 6000 K (Hirose, 2013). Los resultados revelan la importancia de considerar la entropía electrónica a altas temperaturas, mostrando que el modelo Ab Initio de Belonoshko (2003) subestima esta variable. Al integrar estos hallazgos con los modelos experimentales de Morard (2018) y los cálculos de Machine Learning de Alfé (2002), se mejora la precisión de los resultados obtenidos, validando el cambio de fase en los 130 GPa y la liberación de energía en el rango de 130 -180 GPa explicando la liberación de energía desde fases de presión más superficiales.

## 8. REFERENCIAS

- A De Moya, A.M. Elena, M. Blanchard, G. Morard, C., & Pinilla, (2020) First- principles calculation of Fe(1-x) Sx liquid alloys at conditions of Earth's outer core.
- Alfè, D., & Gillan, M. J. (1998). First-principles simulations of liquid Fe-S under Earth's core conditions. *Physical Review B*, 58(13), 8248–8256.  
doi:10.1103/physrevb.58.8248.
- Alfe, D., Kresse, G., & Gillan, M. (2000). Structure and dynamics of liquid iron under Earth's core conditions. *Physical Review B*, 61(1), 132–142.
- Alfè, D., Gillan, M. J., & Price, G. D. (2002). Composition and temperature of the Earth's core constrained by combining ab initio calculations and seismic data. *Earth and Planetary Science Letters*, 195(1-2), 91-98. [https://doi.org/10.1016/S0012-821X\(01\)00540-4](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(01)00540-4)
- Alfè, D., Gillan, M. J. Y., & Price, G. D. (2002). Composition and temperature of the Earth's core constrained by combining ab initio calculations and seismic data. *Earth and Planetary Science Letters*, 195, 91–98
- Alfè, D; Vo adlo, L; Price, G D; Gillan, M J (2004). Melting curve of materials: Theory versus experiments.
- Anderson, O. (1986). Properties of Iron at the Earth's Core Conditions. *Geophysical Journal*

*International*, 84(3), 561-579.

- Antonangeli, Daniele, et al. (2023). Physical Properties of Fe-S and Fe-CS Alloys Under Planetary Core Conditions. *AGU23*.
- Ashby, M. F., & Jones, D. R. H. (2012). *Engineering Materials 1: An Introduction to Their Properties and Applications*
- Badro, J., Côté, A. S., & Brodholt, J. P. (2014). A seismologically consistent compositional model of Earth's core. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111(21), 7542-7545.
- Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons. *Physical review letters*, 104(13), 136403.
- Bazhanova, Z. G., Roizen, V. V., & Oganov, A. R. (2017). High-pressure behavior of the Fe-S system and composition of the Earth's inner core. *Physics-Uspekhi*, 60(10), 1025.
- Beinert, H., Holm, R. H., & Munck, E. (1997). Iron-sulfur clusters: Nature's modular, multipurpose structures. *Science*, 277(5326), 653-659.
- Belashchenko, D. K. (2014). Estimation of the thermodynamic characteristics of the Earth's core using the embedded atom model. *Geochemistry International*, 52(6), 456-466. doi:10.1134/s001670291406002
- Belonoshko, A. B., Ahuja, R., & Johansson, B. (2000). Quasi-ab initio molecular dynamic study of Fe melting. *Physical review letters*, 84(16), 3638.
- Belonoshko, A. B., Ahuja, R., & Johansson, B. (2003). Stability of the body-centred-cubic phase of iron in the Earth's inner core. *Nature*, 424(6952), 1032-1034.
- Boehler, R., Santamaria-Perez, D., Errandonea, D., & Mezouar, M. (2007). New experimental data on Fe and Fe-S melting and the temperature at the core-mantle boundary. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 71, A103-A103.
- Buono, A.S., & Walker, D. (2011). The Fe-rich liquidus in the Fe-FeS system from 1 bar

- to 10 GPa. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 75(8), 2072-2087.
- Cao, A., & Romanowicz, B. (2004). Hemispherical transition of seismic attenuation at the top of the Earth's inner core. *Earth and Planetary Science Letters*, 228(3-4), 243-253.
- De Jong, W. A., Cowley, D. E., Dunning, T. H., & Vorpapel, E. R. (2010). *Molecular Science Computing: 2010 Greenbook* (No. PNNL-15739 Rev. 2). Pacific Northwest National Lab. (PNNL), Richland, WA (United States).
- Deuss, A. (2008). Normal mode constraints on shear and compressional wave velocity of the Earth's inner core. *Earth and Planetary Science Letters*, 268:364–75
- Dubrovinsky, L. S., Saxena, S. K., Tutti, F., Rekh, S., & LeBehan, T. (2000). In situ X-ray study of thermal expansion and phase transition of iron at multimegabar pressure. *Physical Review Letters*, 84(8), 1720.
- Dziewonski, A. M., & Anderson, D. L. (1981). Preliminary reference Earth model. *Physics of the earth and planetary interiors*, 25(4), 297-356.
- Gale, J. D., & Wright, K. (2010). Lattice dynamics from force-fields as a technique for minerals physics. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 71(1), 391-411.
- Gillan, M. J. (1998). First principles simulations of liquid Fe-S under Earth's core conditions. *arXiv preprint Cond-mat/9804035*.
- Halgren, T. A. (1996). Merck molecular force field. V. Extension of MMFF94 using experimental data, added computational data, and empirical rules. *Journal of Computational Chemistry*, 17(5-6), 616-641.
- Hirose, K., Labrosse, S., & Hernlund, J. (2013). Composition and state of the core. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 41, 657-691.
- Huang, H., Leng, C., Wang, Q., Yang, G., Hu, X., Wu, Y., Liu, X., & Fei, Y. (2018). Measurements of Sound Velocity of Liquid Fe-11.8wt%S up to 211.4 GPa and 6,150K. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 123(6), 4730–4739.

- Jackson, J. M., Sturhahn, W., Lerche, M., Zhao, J., Toellner, T. S., Alp, E. E., ... & Wicks, J. K. (2013). Melting of compressed iron by monitoring atomic dynamics. *Earth and Planetary Science Letters*, 362, 143-150.
- LAMMPS Molecular Dynamics Simulator Documentation (2021).  
Recuperado de: <http://lammps.sandia.gov>.
- Littleton, J. A., Secco, R. A., & Yong, W. (2021). Electrical resistivity of FeS at high pressures and temperatures: Implications of thermal transport in the core of Ganymede. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 126(5), e2020JE006793.
- Mao, H., Wu, Y., Chen, L., Shu, J. & Jephcoat, A. (1990). Static Compression of Iron to 300 GPa and Fe<sub>0.8</sub>Ni<sub>0.2</sub> alloy to 260 GPa: Implications for Composition of the Core. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 95(B13), 21737-21742.
- Morard, G., Andrault, D., Antonangeli, D., & Bouchet, J. (2014). Properties of iron alloys under the Earth's core conditions. *Comptes Rendus Geoscience*, 346(5-6), 130-139.
- Morard, G., Andrault, D., Antonangeli, D., Nakajima, Y., Auzende, A. L., Boulard, E., ... & Mezouar, M. (2017). Fe–FeO and Fe–Fe<sub>3</sub>C melting relations at Earth's core–mantle boundary conditions: Implications for a volatile-rich or oxygen-rich core. *Earth and Planetary Science Letters*, 473, 94-103.
- Morard, G., Bouchet, J., Rivoldini, A., Antonangeli, D., Roberge, M., Boulard, E., ... & Mezouar, M. (2018). Liquid properties in the Fe-FeS system under moderate pressure: Toolbox to model small planetary cores. *American Mineralogist*, 103(11), 1770-1779.
- Ono, S., Oganov, A. R., Brodholt, J. P., Vočadlo, L., Wood, I. G., Lyakhov, A., ... & Price,

- G.D. (2008). High-pressure phase transformations of FeS: novel phases at conditions of planetary cores. *Earth and Planetary Science Letters*, 272(1-2), 481-487.
- Huang, H., Leng, C., Wang, Q., Yang, G., Hu, X., Wu, Y., Liu, X., & Fei, Y. (2018). Measurements of Sound Velocity of Liquid Fe-11.8wt%S up to 211.4 GPa and 6,150K. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 123(6), 4730–4739.
- LAMMPS Molecular Dynamics Simulator Documentation (2021). Recuperad de: <http://lammps.sandia.gov>.
- Littleton, J. A., Secco, R. A., & Yong, W. (2021). Electrical resistivity of FeS at high pressures and temperatures: Implications of thermal transport in the core of Ganymede. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 126(5), e2020JE006793.
- Mao, H., Wu, Y., Chen, L., Shu, J. & Jephcoat, A. (1990). Static Compression of Iron to 300 GPa and Fe<sub>0.8</sub>Ni<sub>0.2</sub> alloy to 260 GPa: Implications for Composition of the Core. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 95(B13), 21737-21742.
- Montgomery, D. C., & Runger, G. C. (2014). Applied Statistics and Probability for Engineers. John Wiley & Sons.
- Morard, G., Andrault, D., Antonangeli, D., & Bouchet, J. (2014). Properties of iron alloys under the Earth's core conditions. *Comptes Rendus Geoscience*, 346(5-6), 130-139.
- Morard, G., Andrault, D., Antonangeli, D., Nakajima, Y., Auzende, A. L., Boulard, E., ... & Mezouar, M. (2017). Fe–FeO and Fe–Fe<sub>3</sub>C melting relations at Earth's core–mantle boundary conditions: Implications for a volatile-rich or oxygen-rich core.

*Earth and Planetary Science Letters*, 473, 94-103.

- Morard, G., Bouchet, J., Rivoldini, A., Antonangeli, D., Roberge, M., Boulard, E., ... & Mezouar, M. (2018). Liquid properties in the Fe-FeS system under moderate pressure: Toolbox to model small planetary cores. *American Mineralogist*, 103(11), 1770-1779.
- Ono, S., Oganov, A. R., Brodholt, J. P., Vočadlo, L., Wood, I. G., Lyakhov, A., ... & Price, G.D. (2008). High-pressure phase transformations of FeS: novel phases at conditions of planetary cores. *Earth and Planetary Science Letters*, 272(1-2), 481-487.
- Poirier, J. P. (1994). Light elements in the Earth's outer core: a critical review. *Physics of the Earth and Planetary interiors*, 85(3-4), 319-337
- Poirier, J. P. (2000). *Introduction to the Physics of the Earth's Interior*. Cambridge University Press.
- Probert, M. (2011). *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, by Richard M. Martin: Scope: graduate level textbook. Level: Theoretical materials scientists/condensed matter physicists/computational chemists.
- Sherman, D. (1995). Stability of Possible Fe-FeS and Fe-FeO Alloy Phases at High Pressure and the Composition of the Earth's Core. *Earth and Planetary Science Letters*, 132(1- 4), 87-98.
- Svendsen, B., Anderson, W. W., Ahrens, T. J., & Bass, J. D. (1989). Ideal Fe-FeS, Fe-FeO phase relations and Earth's core. *Physics of the earth and planetary interiors*, 55(1-2), 154-186.
- Vočadlo, L., Alfe, D., Gillan, M. J., & Price, G. D. (2003). The properties of iron under

core conditions from first principles calculations. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 140(1-3), 101-125.

Umemoto, K., & Hirose, K. (2020). Chemical compositions of the outer core examined by first principles calculations. *Earth and Planetary Science Letters*, 531, 116009.

Y. Wang, H. K. Mao, R. J. Hemley, and A. F. Goncharov, "High-pressure phase transitions of iron", *Nature*, vol. 387, 1997, pp. 256-258.

Zhang, Z., Csányi, G., & Alfè, D. (2020). Partitioning of sulfur between solid and liquid iron under Earth's core conditions: Constraints from atomistic simulations with machine learning potentials. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 291, 5.