



UNIVERSIDAD  
DE SEVILLA

---

Facultad de Física

MÁSTER INTERUNIVERSITARIO EN FÍSICA NUCLEAR

TRABAJO FIN DE MÁSTER

**DESARROLLO DE UNA APLICACIÓN  
INFORMÁTICA PARA EL ESTUDIO DE LAS SERIES  
RADIATIVAS Y LA REALIZACIÓN DE CÁLCULOS  
DE DATACIÓN**

*Autor*  
Manuel Martínez Rojas

*Tutores*  
Manuel García León  
Juan Mantero Cabrera

Curso 2022-2023

# Índice

1.	Introducción.	1
2.	Ecuaciones de Bateman, series radiactivas y datación.	2
2.1.	Ecuaciones de Bateman: cálculo de poblaciones y actividades.	2
2.1.1.	Equilibrio secular.	3
2.1.2.	Equilibrio transitorio.	4
2.2.	Series radiactivas naturales y radiactividad artificial.	5
2.2.1.	Serie del $^{238}\text{U}$ o $4n + 2$ .	6
2.2.2.	Serie del $^{232}\text{Th}$ o $4n$ .	6
2.2.3.	Serie del $^{235}\text{U}$ o $4n + 3$ .	6
2.2.4.	Radiactividad artificial y serie del $^{237}\text{Np}$ o $4n + 1$ .	6
2.3.	Datación geológica basada en disequilibrios en la serie del $^{238}\text{U}$ .	9
2.3.1.	Método de $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ .	10
2.3.2.	Método de $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ .	11
2.4.	Datación de sedimentos a partir de su contenido en $^{210}\text{Pb}$ .	13
2.4.1.	Notación y relaciones fundamentales.	14
2.4.2.	Modelos.	16
2.4.2.1.	CA (Constant Activity) o CIC (Constant Initial Concentration).	16
2.4.2.2.	CS (Constant Sedimentation).	17
2.4.2.3.	CF (Constant Flux) o CRS (Constant Rate of Supply).	17
2.4.2.4.	CFCS (Constant Flux Constant Sedimentation).	18
3.	Desarrollo de una aplicación informática para el estudio de las series radiactivas y cálculos de datación. RULES: RaPCUBES (Radioactivity and Population Calculator Using Bateman Equations' Solutions), URADS (Uranium Routines Application for Dating Samples) and LEADS (Lead Employed Approaches for Dating Sediments) Encompassed Software.	19
3.1.	RaPCUBES: Radioactivity and Population Calculator Using Bateman Equations' Solutions.	20
3.1.1.	Base de datos.	21
3.1.2.	Interfaz de usuario e instrucciones de uso.	23
3.2.	URADS: Uranium Routines Application for Dating Samples.	26
3.2.1.	Base de datos.	26
3.2.2.	Interfaz de usuario e instrucciones de uso.	27
3.3.	LEADS: Lead Employed Approaches for Dating Sediments.	30

3.3.1.	Base de datos.	31
3.3.2.	Interfaz de usuario e instrucciones de uso.	32
4.	Ejemplos de uso de la aplicación RULES.	35
4.1.	Datación y análisis de muestras de calcita tomadas en el Peñón de Gibraltar con URADS y RaPCUBES.	35
4.2.	Datación de una muestra de sedimento tomada del golfo de Tehuantepec con LEADS.	39
5.	Conclusiones, utilidades y vías de desarrollo.	43
6.	Bibliografía.	46

## 1. Introducción.

Los núcleos radiactivos forman parte de la Naturaleza, o bien han sido incorporados a ella como consecuencia de actividades humanas realizadas, fundamentalmente, desde mediados del siglo XX. Por lo tanto, su estudio es de gran interés para la realización de tareas muy diversas, como la radioterapia y el radiodiagnóstico en Medicina, la extracción de energía en centrales nucleares, la datación geológica o el análisis de sustancias (presencia de contaminantes en suelos, aguas, alimentos, residuos y aire en protección radiológica, composición de materiales, contenido en humedad...) [1].

Para la resolución de los cálculos relacionados con todos esos trabajos, es esencial conocer las ecuaciones de Bateman, que modelan la evolución temporal de las poblaciones y actividades de los radionúclidos. En general, los problemas más simples pueden solucionarse con expresiones cortas y operaciones rápidas. Sin embargo, la presencia de varios elementos de una misma familia radiactiva en una muestra, la segmentación múltiple de sedimentos o el interés por emplear una interfaz gráfica para la observación de resultados, hacen que sea de gran interés la automatización de procesos con ayuda de computadoras.

El objetivo principal de este Trabajo de Fin de Máster es elaborar una aplicación informática gratuita con la que poder calcular poblaciones y actividades de los diferentes radioisótopos que componen las series radiactivas naturales ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$  y  $^{232}\text{Th}$ ) y la del  $^{237}\text{Np}$ . Además, debe proporcionar herramientas con las que realizar operaciones de datación de sedimentos basadas en el método de  $^{210}\text{Pb}$ , y de muestras geológicas con fundamento en desequilibrios radiactivos entre el uranio y sus descendientes en la serie del  $^{238}\text{U}$ . En particular, nos centraremos en las técnicas relacionadas con los cocientes  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ . La primera parte del proyecto ya fue el tema principal del TFG (Trabajo de Fin de Grado) del mismo alumno [2], pero ha sido recuperada en este por su evolución desde entonces y el mayor interés del instrumento global generado.

Por otro lado, este documento se compone de varias secciones en las que desarrollaremos las ideas fundamentales. En primer lugar, la sección 2 recoge los principales aspectos teóricos relativos a los temas que nos ocupan. Después, en el apartado 3, daremos algunas notas acerca de cómo está construida la herramienta elaborada y explicaremos en detalle sus instrucciones de uso. Más adelante, en el punto 4, emplearemos datos de estudios reales y los introduciremos como elementos de entrada de nuestro programa, para comparar los resultados que podemos obtener con los expuestos por los autores de los trabajos. Finalmente, la sección número 5 contendrá las reflexiones del alumno sobre el producto final obtenido,

incluyendo sus aspectos más notorios y posibles vías de desarrollo futuras, que harían del programa una herramienta aún más interesante.

## 2. Ecuaciones de Bateman, series radiactivas y datación.

Los aspectos teóricos fundamentales que dan soporte a este trabajo son: las ecuaciones de Bateman, que conforman el aparato matemático común a los diferentes problemas a resolver, las series radiactivas, compuestas por los radionúclidos que queremos estudiar, y los modelos físicos básicos de datación por los métodos de  $^{210}\text{Pb}$  y uranio, con las diversas aproximaciones que plantean para analizar distintos tipos de muestras.

### 2.1. Ecuaciones de Bateman: cálculo de poblaciones y actividades.

Las ecuaciones de Bateman son un conjunto de EDOs (Ecuaciones Diferenciales Ordinarias) de primer orden que modelan el fenómeno de la desintegración radiactiva a partir de una estadística de Poisson. Así, reflejan la evolución temporal de las poblaciones y actividades de los radioisótopos [3].

En primer lugar, Henri Becquerel descubrió la radiactividad en 1896, y de vital importancia fue la descripción del fenómeno llevada a cabo por Marie y Pierre Curie. Paralelamente, Ernest Rutherford identificó los decaimientos de los tipos alfa y beta, en 1898, mientras que Paul Ulrich Villard halló la radiación gamma, en 1900. En ese mismo año, Rutherford observó la independencia de la fracción de núcleos de la misma especie desintegrados tras un mismo lapso de tiempo con el tamaño de la muestra. En particular, definió la semivida o periodo de semidesintegración,  $T_{\frac{1}{2}}$ , como el intervalo temporal que debe transcurrir para que una población de radioisótopos iguales se reduzca a la mitad. Con ello, elaboró, en 1905, un sistema de EDOs de primer orden que, para el caso de una cadena lineal de  $n$  elementos, tiene la forma

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1 \quad (1)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = -\lambda_i N_i + \lambda_{i-1} N_{i-1}, \quad (i = 2, 3, \dots, n),$$

donde  $N_i$  es la población del núcleo  $i$ -ésimo,  $t$ , el tiempo, y  $\lambda_i$ , su constante de decaimiento, que se relaciona con la semivida según la ecuación

$$\lambda_i = \frac{\ln(2)}{T_{\frac{1}{2}}^i} [4]. \quad (2)$$

Sin embargo, fue en 1910 cuando Harry Bateman publicó un artículo titulado Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations, en

el que obtenía soluciones analíticas al problema [5]. De ellas, se deduce que la expresión general para la población de un radionúclido cualquiera perteneciente a una serie radiactiva lineal es

$$N_n(t) = \sum_{p=1}^{n-1} \left[ \prod_{i=p}^{n-1} \lambda_i \left( \sum_{k=p}^n \frac{N_p(0) e^{-\lambda_k t}}{\prod_{j=p, j \neq k}^n (\lambda_j - \lambda_k)} \right) \right] + N_n(0) e^{-\lambda_n t}. \quad (3)$$

En particular, si inicialmente solo hay población del primer radioisótopo de la familia que forma parte de la muestra, encontramos

$$N_n(t) = N_1(0) \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \left( \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\lambda_k t}}{\prod_{j=1, j \neq k}^n (\lambda_j - \lambda_k)} \right) [6]. \quad (4)$$

Asimismo, la actividad es una magnitud indispensable en el estudio de sistemas radiactivos y se define como

$$A_i(t) = -\frac{dN_i(t)}{dt} = \lambda_i N_i(t) \quad (5)$$

Estas relaciones conforman la base matemática de los diferentes problemas que nos ocupan, a los que darán forma combinándose con otras expresiones, magnitudes y aproximaciones, para tratar de ajustarse a situaciones reales. Concretamente, con respecto a la relación de actividades entre un radionúclido padre y su hijo, encontramos un par de casos de especial interés: equilibrio secular y equilibrio transitorio. A continuación, describiremos las condiciones en las que ocurren ambos escenarios, partiendo, en cada caso, de una población inicial con contenido exclusivo del núcleo padre, es decir, emplearemos la ecuación (4).

### 2.1.1. Equilibrio secular.

El equilibrio secular se alcanza cuando la semivida del radioisótopo progenitor, A, es muy larga con respecto a la del hijo, B, y, además, ha transcurrido un tiempo suficientemente grande comparado con el periodo de semidesintegración del descendiente desde que solo había población del padre. Matemáticamente, esto se expresa como

$$\begin{aligned} T_{\frac{1}{2},A} &\gg T_{\frac{1}{2},B} \rightarrow \lambda_A \ll \lambda_B \\ t &\gg T_{\frac{1}{2},B} \end{aligned} \quad (6)$$

y, definiendo la población inicial del padre,  $N_0$ , la actividad del hijo queda

$$A_B(t) = \frac{\lambda_A \lambda_B N_0}{\lambda_B - \lambda_A} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}) \cong \lambda_A N_0 e^{-\lambda_A t} = A_A(t), \quad (7)$$

igual a la del anterior. Como consecuencia, el descendiente decae, aparentemente, con la semivida del progenitor [4], [7].

En la *Figura 1* mostramos un ejemplo que refleja las circunstancias descritas. Para ello, hemos acudido a la serie radiactiva del  $^{232}\text{Th}$  y hemos seleccionado una actividad inicial de

9,5 Bq del  $^{228}\text{Ra}$ , con una semivida de  $(5,75 \pm 0,03)$  y, que genera  $^{228}\text{Ac}$ , caracterizado por un periodo de semidesintegración de  $(6,15 \pm 0,02)$  h. Como podemos ver en la imagen (a), la actividad del hijo aumenta desde cero hasta igualarse a la del padre transcurridos unos tres días, situación que se mantiene si el sistema permanece aislado. Paralelamente, en (b), representamos el cociente de actividades, que muestra una clara tendencia a la unidad.

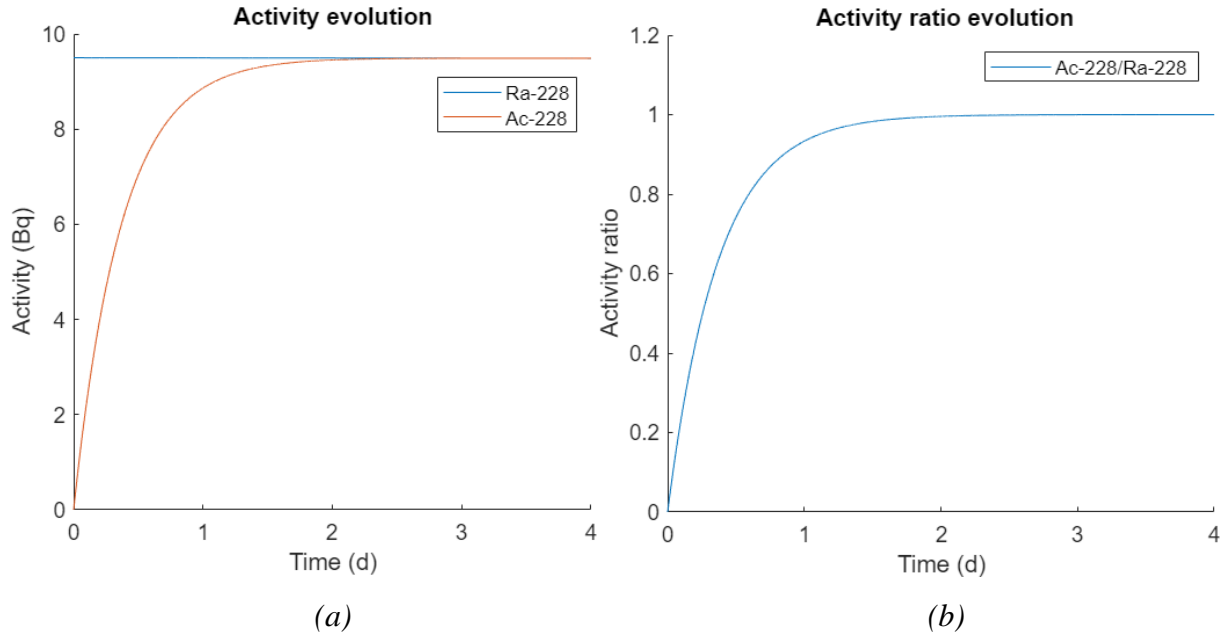


Figura 1. Equilibrio secular entre  $^{228}\text{Ac}$  y  $^{228}\text{Ra}$ , pertenecientes a la serie radiactiva del  $^{232}\text{Th}$ . (a) Evolución temporal de actividades. (b) Evolución temporal del cociente de actividades.

### 2.1.2. Equilibrio transitorio.

El equilibrio transitorio ocurre cuando la semivida del progenitor, A, es algo mayor que la del hijo, B, y, además, ha transcurrido un tiempo suficiente desde que solo había población del padre. Estas condiciones se expresan matemáticamente como

$$T_{\frac{1}{2},A} > T_{\frac{1}{2},B} \rightarrow \lambda_A < \lambda_B \quad (8)$$

$$t \gg T_{\frac{1}{2},B},$$

dando una actividad para el descendiente de

$$A_B(t) = \frac{\lambda_A \lambda_B N_0}{\lambda_B - \lambda_A} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}) \cong \frac{\lambda_A \lambda_B N_0}{\lambda_B - \lambda_A} e^{-\lambda_A t} = \frac{\lambda_B}{\lambda_B - \lambda_A} A_A(t). \quad (9)$$

De aquí se deduce que, aunque las tasas de desintegración no se mantienen iguales, sí que son proporcionales, y el hijo parece decaer con el mismo periodo de semidesintegración que su padre [4], [8].

La Figura 2 ilustra la situación descrita. En este caso, hemos empleado la familia radiactiva del  $^{235}\text{U}$ , de la que hemos elegido al  $^{227}\text{Th}$  como núcleo padre, con una semivida de  $(18,697 \pm 0,007)$  d, y al  $^{223}\text{Ra}$  como hijo, con un periodo de semidesintegración de

$(11,43 \pm 0,05)$  d. En la imagen (a), observamos un crecimiento inicial en la actividad del segundo a medida que decae el otro, hasta alcanzar un valor máximo en el instante de tiempo  $(20,9 \pm 0,4)$  d, en el que ambas actividades se igualan. Después, la función se vuelve monótona decreciente hasta anularse hacia los 200 días con la cadencia del padre. Por otro lado, en (b) representamos el cociente de actividades que, ahora, tiende a un valor superior a la unidad, en concreto, a  $(2,573 \pm 0.018)$ .

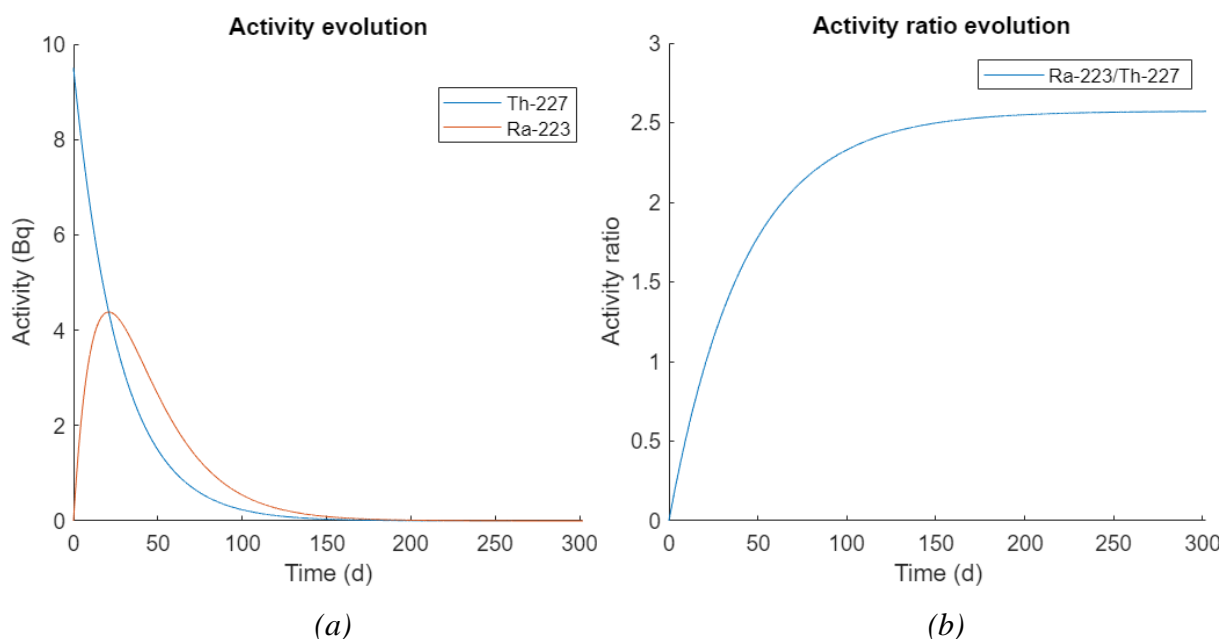


Figura 2. Equilibrio transitorio entre  $^{223}\text{Ra}$  y  $^{227}\text{Th}$ , pertenecientes a la serie radiactiva del  $^{235}\text{U}$ . (a) Evolución temporal de actividades. (b) Evolución temporal del cociente de actividades.

## 2.2. Series radiactivas naturales y radiactividad artificial.

Las series radiactivas son conjuntos de radioisótopos relacionados por secuencias de desintegración. Comienzan con radionúclidos primigenios y terminan con elementos estables. Entre ellos, se suceden decaimientos alfas, betas y gammas. Los primeros consisten en la emisión de una partícula alfa y un núcleo residual, como indica la expresión  ${}^A_ZX \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + {}^4_2\text{He}$ , donde  $A$  y  $Z$  son los números másico y atómico, respectivamente. El segundo tipo implica la producción de un electrón y antineutrino electrónico, o positrón y neutrino electrónico, acompañados de un núcleo hijo. Así, podemos diferenciar entre desintegraciones  $\beta^-$ , definidas según  ${}^A_ZX \rightarrow {}^A_{Z+1}Y + e^- + \bar{\nu}$ , y  $\beta^+$ , descritas por  ${}^A_ZX \rightarrow {}^A_{Z-1}Y + e^+ + \nu$ . Por último, los decaimientos gamma conllevan la liberación de un fotón como consecuencia de la desexcitación nuclear de un radionúclido, es decir,  ${}^A_ZX^* \rightarrow {}^A_ZX + \gamma$ . Generalmente, estas emisiones acompañan a decaimientos de las dos categorías anteriores, que generan núcleos residuales en estados excitados. Además, estos estados inestables presentan semividas muy cortas, por lo que los omitiremos de aquí en adelante para la realización de los cálculos pertinentes.



A continuación, presentaremos las cuatro grandes familias radiactivas, encabezadas por  $^{238}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{235}\text{U}$  y  $^{237}\text{Np}$ , y número de nucleones dados por las ecuaciones  $4n + 2$ ,  $4n$ ,  $4n + 3$  y  $4n + 1$ , respectivamente, donde  $n$  es un número natural.

#### 2.2.1. Serie del $^{238}\text{U}$ o $4n + 2$ .

La serie del  $^{238}\text{U}$  fue la primera en ser estudiada durante los experimentos de luminiscencia llevados a cabo por Henri Becquerel con sales de uranio. Unos años después, el matrimonio Curie observó diferentes tipos de emisiones que tenían lugar en muestras con contenido en radio, así como la consecuente generación de productos distintos a los elementos originales. Más adelante, Rutherford y Soddy dedujeron que el  $^{238}\text{U}$  se situaba al comienzo de una cadena de desintegraciones que daban lugar a una variedad de especies entre las que se encontraba el  $^{226}\text{Ra}$  [9]. En la *Figura 3* mostramos el esquema fundamental de la serie del  $^{238}\text{U}$ , donde cada radioisótopo va acompañado de su semivida, cuyos valores han sido extraídos de la base de datos NutDat3 del NNDC (National Nuclear Data Center) [10]. Los decaimientos alfas se indican con flechas verticales apuntando hacia abajo, y los beta, con flechas horizontales orientadas para la derecha. También señalizamos con porcentajes los factores de intensidad correspondientes a cada una de las ramas en las dos bifurcaciones de la cadena. Además, encontramos que la estabilidad se alcanza con el  $^{206}\text{Pb}$  [11]. Por último, cabe mencionar que han sido eliminados de la imagen elementos con una probabilidad de generación menor al 0,001 %:  $^{206}\text{Hg}$  y  $^{206}\text{Tl}$ , procedentes de  $^{210}\text{Pb}$  y  $^{210}\text{Bi}$ , respectivamente, por emisión alfa.

#### 2.2.2. Serie del $^{232}\text{Th}$ o $4n$ .

La serie del  $^{232}\text{Th}$  fue descubierta algo después, cuando el matrimonio Curie halló la presencia de radio en sales de torio y determinó su carácter radiactivo [11]. El diagrama de desintegración de la familia lo podemos visualizar en la *Figura 4*, siendo el núcleo estable en este caso el  $^{208}\text{Pb}$ .

#### 2.2.3. Serie del $^{235}\text{U}$ o $4n + 3$ .

La serie del  $^{235}\text{U}$  fue descubierta por Arthur Jeffrey Dempster y estudiada con gran interés desde 1938, cuando Otto Hahn comenzó a analizar la fisión nuclear [11]. La *Figura 5* refleja la estructura de la familia radiactiva, que finaliza con  $^{207}\text{Pb}$ , y de la que han sido suprimidos el  $^{227}\text{Ra}$ ,  $^{219}\text{At}$  y  $^{215}\text{Bi}$ , procedentes de  $^{231}\text{Th}$ ,  $^{223}\text{Th}$  y  $^{219}\text{At}$ , respectivamente, por decaimientos alfa.

#### 2.2.4. Radiactividad artificial y serie del $^{237}\text{Np}$ o $4n + 1$ .

La radiactividad artificial fue descubierta por Irène y Frédéric Joliot-Curie en 1934, que estudiaron la emisión beta del  $^{13}\text{N}$ , un isótopo inestable nunca antes observado [4]. El origen de este tipo de sustancias se encuentra en los trabajos llevados a cabo en reactores nucleares,

aceleradores de partículas y desarrollo armamentístico durante el último siglo. Así ocurrió la reimplementación de la serie del  $^{237}\text{Np}$  en la Naturaleza, que se presumía extinta por la corta semivida de los radionúclidos que la encabezan en comparación con la edad de la Tierra, de unos cuatro mil quinientos millones de años. El diagrama de la familia se ilustra en la *Figura 6*. En este caso, el eslabón final de la cadena es el  $^{205}\text{Tl}$ , con el que se alcanza la estabilidad.

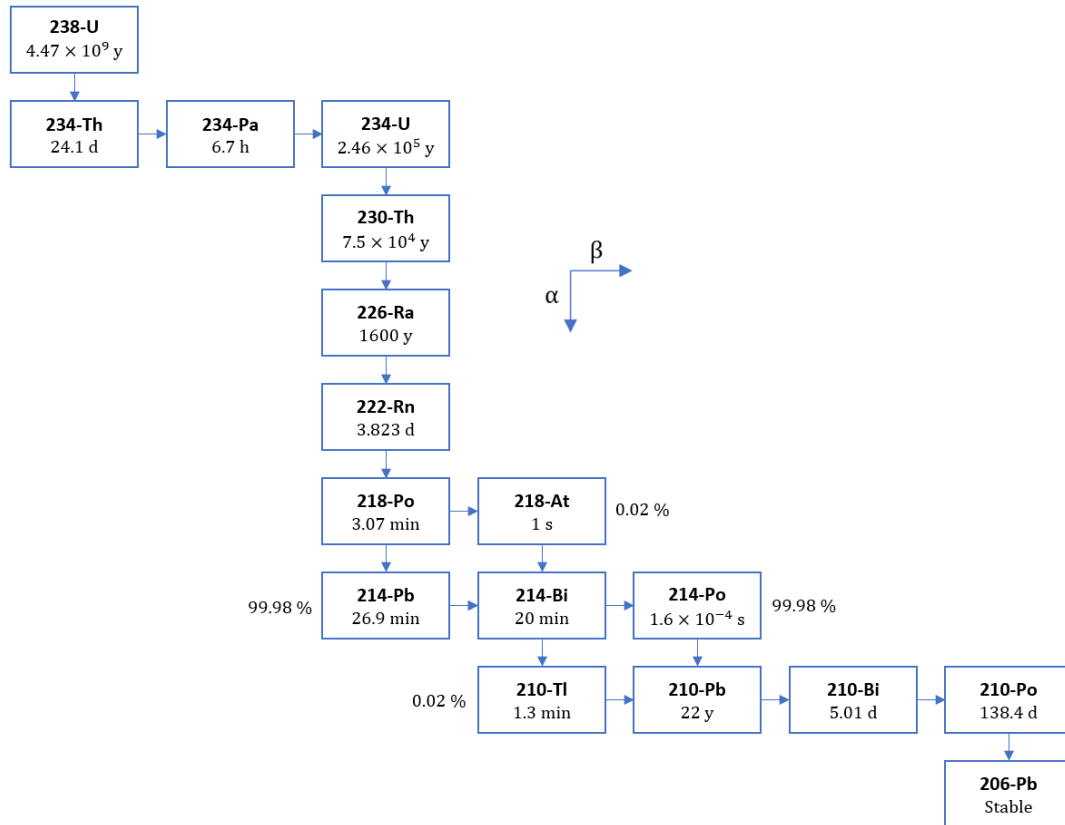


Figura 3. Esquema de la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$ .

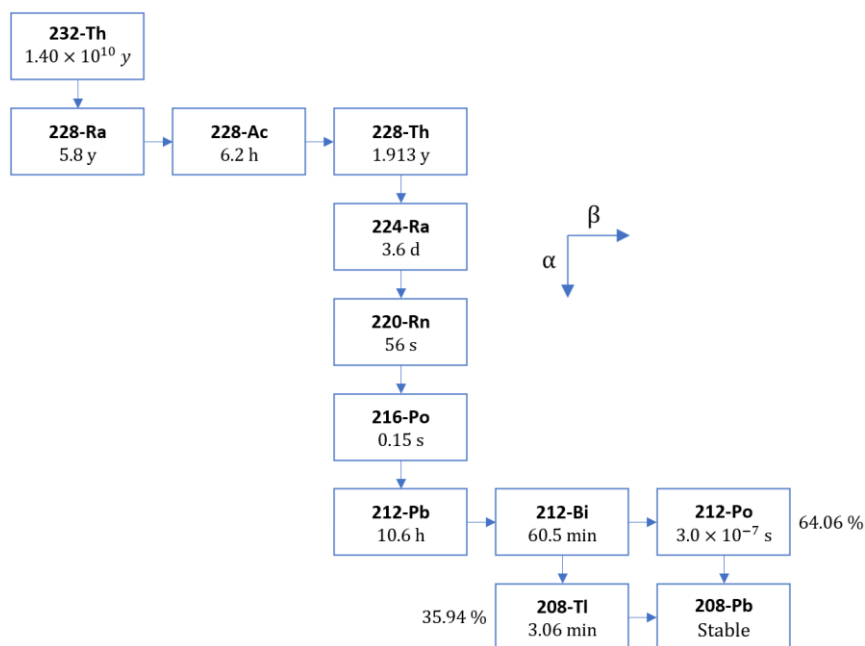


Figura 4. Esquema de la serie radiactiva del  $^{232}\text{Th}$ .

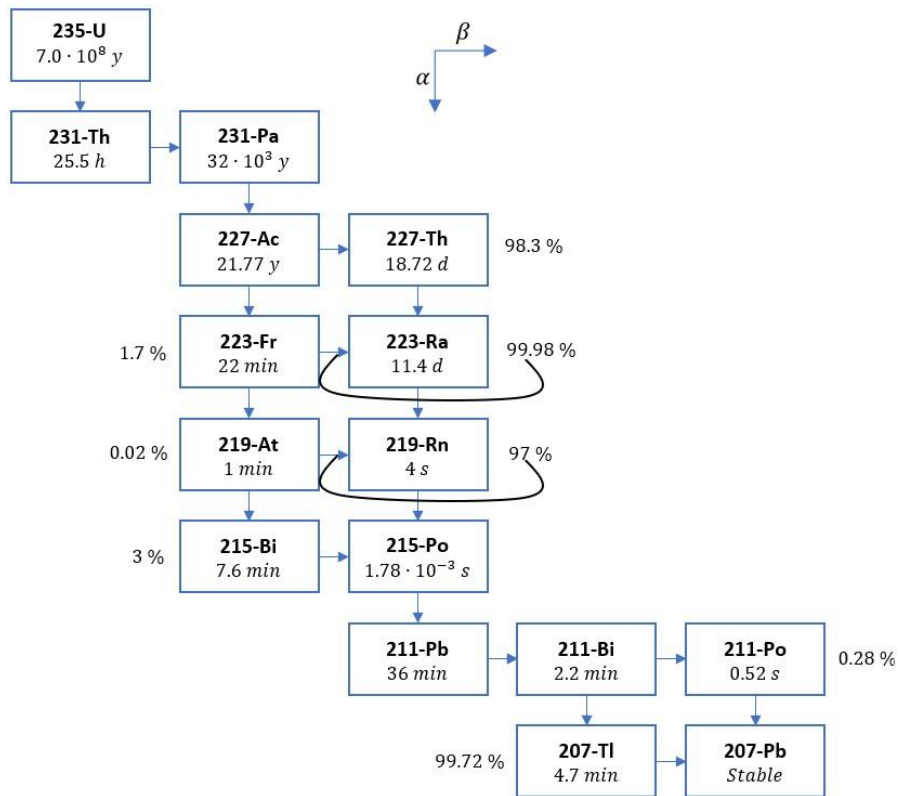


Figura 5. Esquema de la serie radiactiva del  $^{235}\text{U}$ .

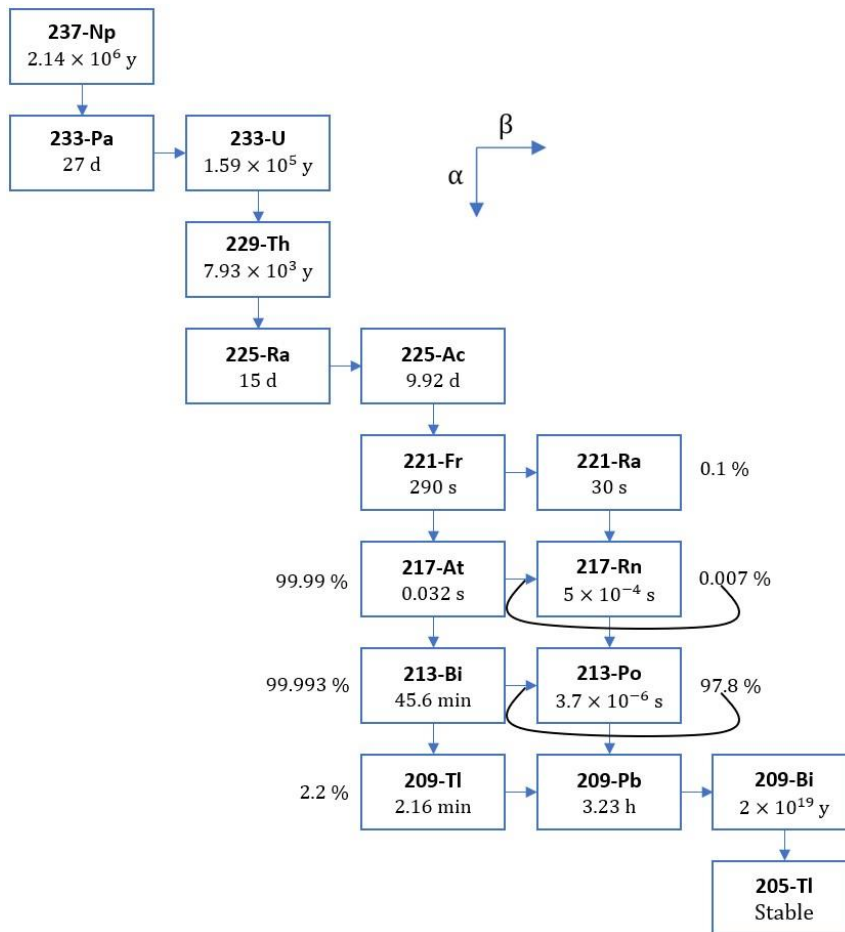


Figura 6. Esquema de la serie radiactiva del  $^{237}\text{Np}$ .

### 2.3. Datación geológica basada en desequilibrios en la serie del $^{238}\text{U}$ .

Las poblaciones de radionúclidos presentan ritmos de desintegración que vienen marcados por sus semividas y las relaciones de parentesco que se establecen entre ellos. Conociendo esto, dado que los núcleos radiactivos forman parte de sistemas naturales, cabe esperar que se puedan emplear las ecuaciones (3) y (5) para efectuar cálculos de datación a partir de las constantes de semidesintegración, que determinarán la aplicabilidad temporal de las expresiones. En general, se pueden distinguir tres grandes grupos de estrategias para evaluar el origen de una muestra. Primero, los métodos más básicos se fundamentan en el decaimiento de un único radioisótopo o en la producción de otro, partiendo de determinados valores iniciales. El segundo tipo se centra en el restablecimiento del equilibrio secular desde una determinada situación desigualada, generada por alguna perturbación externa. Por último, las técnicas del último conjunto implican la generación de algún efecto mensurable de la radiactividad en el sistema de estudio, como la termoluminiscencia.

Concretamente, los métodos de datación geológica basada en desequilibrios en la serie del  $^{238}\text{U}$  pertenecen al segundo grupo. Por tanto, para hacerlos efectivos se deben realizar medidas de actividad de diferentes radionúclidos pertenecientes a la familia radiactiva, entre los que pueda establecerse una situación de equilibrio secular. Para ello, es posible emplear espectroscopía alfa, beta o gamma, con detectores de semiconductor o centello en el último caso, si la muestra es suficientemente activa. Si no fuese así, se podría hacer uso de la espectrometría de masas. Además, para los modelos matemáticos que aquí se van a describir, son requeridas un par de condiciones que el ejemplar analizado debe cumplir. En primer lugar, tiene que ser representativo de la formación geológica completa. Asimismo, desde el establecimiento de las condiciones iniciales, el sistema debe haber permanecido físicamente cerrado, de manera que la única causa de variación en las concentraciones de radioisótopos sea el decaimiento radiactivo de las sustancias que contiene, y no factores externos. Estos, bastante comunes, pueden ser muy variados, como el contacto con fuentes de núcleos radiactivos, la incorporación de restos orgánicos o la extracción por arrastre de fluidos externos, y requieren de tratamientos particulares muy complejos que no vamos a comentar aquí [12].

En representación de los numerosos modelos posibles, han sido elegidos, para esta primera versión completa de la aplicación informática, dos estrategias en las que se recogen las ideas más relevantes del método. También abarcan rangos temporales diferentes que pueden ser de interés para muestras de distinta naturaleza. Una de ellas se centra en la relación de actividades entre  $^{234}\text{U}$  y  $^{238}\text{U}$ , y, en general, se aplica cuando sistema contiene, inicialmente, una cantidad de  $^{234}\text{U}$  en exceso. La otra emplea el hecho de que algunos compuestos absorben

isótopos de uranio, pero no de torio, de modo que se analiza la evolución hacia el equilibrio secular del cociente de actividades entre  $^{230}\text{Th}$  y  $^{234}\text{U}$ . A continuación, desarrollaremos cada estrategia en detalle, describiendo las principales ecuaciones y suposiciones en las que se sustentan.

### 2.3.1. Método de $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ .

La acumulación de uranio es frecuente en sistemas compuestos por carbonatos, como los espeleotemas. Con frecuencia, los radionúclidos son aportados por el contacto con aguas ricas en dichas sustancias. Generalmente, se encuentra que la concentración de isótopos de  $^{234}\text{U}$  es mayor que la de  $^{238}\text{U}$ , es decir, hay un exceso de esa especie. Esto se debe a que la liberación de los primeros por parte del mineral de origen se produce más fácilmente debido a la energía cinética que reciben los núcleos de  $^{234}\text{Th}$ , su antecesor, tras la desintegración alfa del primigenio. Por ello, esperamos medir un cociente de actividades entre  $^{234}\text{U}$  y  $^{238}\text{U}$  superior a la unidad, pero con una tendencia hacia el equilibrio secular.

Una vez vista la fenomenología subyacente, derivaremos la ecuación fundamental empleada en este método de datación. Partiremos de la relación (3) en combinación con la (5) para obtener directamente las expresiones de las actividades correspondientes. Además, supondremos que el  $^{234}\text{U}$  es descendiente directo del  $^{238}\text{U}$ , pues las semividas de los radionúclidos intermedios,  $^{234}\text{Th}$  y  $^{234}\text{Pa}$ , son despreciables en comparación con la del que encabeza la familia. Así, tenemos que resolver las ecuaciones de Bateman para una cadena simple de dos isótopos radiactivos. Para agilizar el proceso y facilitar la lectura, denotaremos por  $A_8$  y  $\lambda_8$ ,  $A_4$  y  $\lambda_4$ , a las actividades y constantes de desintegración del  $^{238}\text{U}$  y del  $^{234}\text{U}$ , respectivamente. Con todo esto, podemos calcular

$$\begin{aligned} A_8(t) &= A_8(0)e^{-\lambda_8 t} \\ A_4(t) &= A_4(0)e^{-\lambda_4 t} + A_8(0) \frac{\lambda_4}{\lambda_4 - \lambda_8} (e^{-\lambda_8 t} - e^{-\lambda_4 t}). \end{aligned} \quad (10)$$

Si definimos el cociente de ambas magnitudes como  $R(t)$ , llegamos a

$$R(t) = \frac{A_4(t)}{A_8(t)} = \frac{A_4(0)}{A_8(0)} e^{(\lambda_8 - \lambda_4)t} + \frac{\lambda_4}{\lambda_4 - \lambda_8} (1 - e^{(\lambda_8 - \lambda_4)t}). \quad (11)$$

Finalmente, dado que la semivida del  $^{238}\text{U}$  es cuatro órdenes de magnitud superior a la del  $^{234}\text{U}$  y, por tanto,

$$T_{\frac{1}{2},8} \gg T_{\frac{1}{2},4} \rightarrow \lambda_8 \ll \lambda_4, \quad (12)$$

la expresión final aproximada es

$$R(t) \cong 1 + [R(0) - 1]e^{-\lambda_4 t} \quad [13]. \quad (13)$$

La ecuación del método permite datar muestras con una antigüedad de hasta un millón de años. A pesar de ser muy simple, conlleva la dificultad de conocer el cociente de actividades en el instante inicial, lo que no es posible en muchas ocasiones. En sistemas afectados por agua dulce, se puede intentar hallar este valor a partir del análisis de varias muestras extraídas de diferentes zonas de mismo espécimen, puesto que las concentraciones disueltas suelen presentar una gran variabilidad. Por otro lado, para restos marinos, como los corales, la proporción inicial de radioisótopos en el agua es más constante y uniforme, favoreciendo la aplicación del modelo [12].

### 2.3.2. Método de $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ .

Existe un cierto tipo de sistemas geológicos ricos en carbonatos que absorben uranio, pero no torio, ya que este forma compuestos poco solubles y apenas se encuentra en las aguas naturales. Sin embargo, dicho elemento radiactivo forma parte de la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$  y se irá generando en el medio a medida que su ascendencia se vaya desintegrando. De este modo, encontramos que podemos tomar como instante inicial de la formación del sistema aquel en el que la actividad del torio es nula.

Seguimos el proceso de deducción del apartado anterior, considerando, en este caso, que estamos trabajando con una cadena lineal compuesta por tres radionúclidos, que son  $^{238}\text{U}$ ,  $^{234}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}$ , con sus respectivas relaciones de parentesco. Estableciendo como  $A_0$  y  $\lambda_0$  la actividad y constante de decaimiento del  $^{230}\text{Th}$ , y sabiendo que  $A_0(0) = 0$ , a las expresiones mostradas en (10), hay que añadirles

$$\begin{aligned}
 A_0(t) = & A_4(0) \frac{\lambda_0}{\lambda_0 - \lambda_4} (e^{-\lambda_4 t} - e^{-\lambda_0 t}) \\
 & + A_8(0) \lambda_0 \lambda_4 \left( \frac{e^{-\lambda_8 t}}{(\lambda_0 - \lambda_8)(\lambda_4 - \lambda_8)} + \frac{e^{-\lambda_4 t}}{(\lambda_0 - \lambda_4)(\lambda_8 - \lambda_4)} \right. \\
 & \left. + \frac{e^{-\lambda_0 t}}{(\lambda_4 - \lambda_0)(\lambda_8 - \lambda_0)} \right). \tag{14}
 \end{aligned}$$

Ahora, definimos el cociente

$$T(t) = \frac{A_0(t)}{A_4(t)} = \frac{A_0(t)}{A_8(t) \frac{A_4(t)}{A_8(t)}} = \frac{A_0(t)}{A_8(t) R(t)}, \tag{15}$$

donde

$$\begin{aligned} \frac{A_0(t)}{A_8(t)} = R(0) \frac{\lambda_0}{\lambda_0 - \lambda_4} & (e^{(\lambda_8 - \lambda_4)t} - e^{(\lambda_8 - \lambda_0)t}) \\ & + \lambda_0 \lambda_4 \left( \frac{1}{(\lambda_0 - \lambda_8)(\lambda_4 - \lambda_8)} + \frac{e^{(\lambda_8 - \lambda_4)t}}{(\lambda_0 - \lambda_4)(\lambda_8 - \lambda_4)} \right. \\ & \left. + \frac{e^{(\lambda_8 - \lambda_0)t}}{(\lambda_4 - \lambda_0)(\lambda_8 - \lambda_0)} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Finalmente, realizamos de nuevo la aproximación pertinente basándonos en que la semivida del  $^{238}\text{U}$  es mucho más larga que las de  $^{234}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}$ , o, matemáticamente,

$$T_{\frac{1}{2},8} \gg T_{\frac{1}{2},4}, T_{\frac{1}{2},0} \rightarrow \lambda_8 \ll \lambda_4, \lambda_0. \quad (17)$$

Con todo esto, alcanzamos la ecuación definitiva del modelo

$$T(t) = \frac{1 - e^{-\lambda_0 t}}{R(t)} + \left[ 1 - \frac{1}{R(t)} \right] \frac{\lambda_0}{\lambda_0 - \lambda_4} (1 - e^{-(\lambda_0 - \lambda_4)t}). \quad (18)$$

Esta estrategia tiene la ventaja de que no es necesario conocer valores iniciales, simplemente hay que medir tres actividades. En cambio, el tiempo se debe calcular a partir de la ecuación (18), donde aparece de forma implícita y no se puede despejar. Asimismo, la antigüedad máxima de las muestras que se logran datar de este modo es de, aproximadamente, medio millón de años. En la *Figura 7* se muestran algunas de las curvas de datación obtenidas al representar  $R$  frente a  $T$  para diferentes edades entre los veinte mil y los seiscientos mil años.

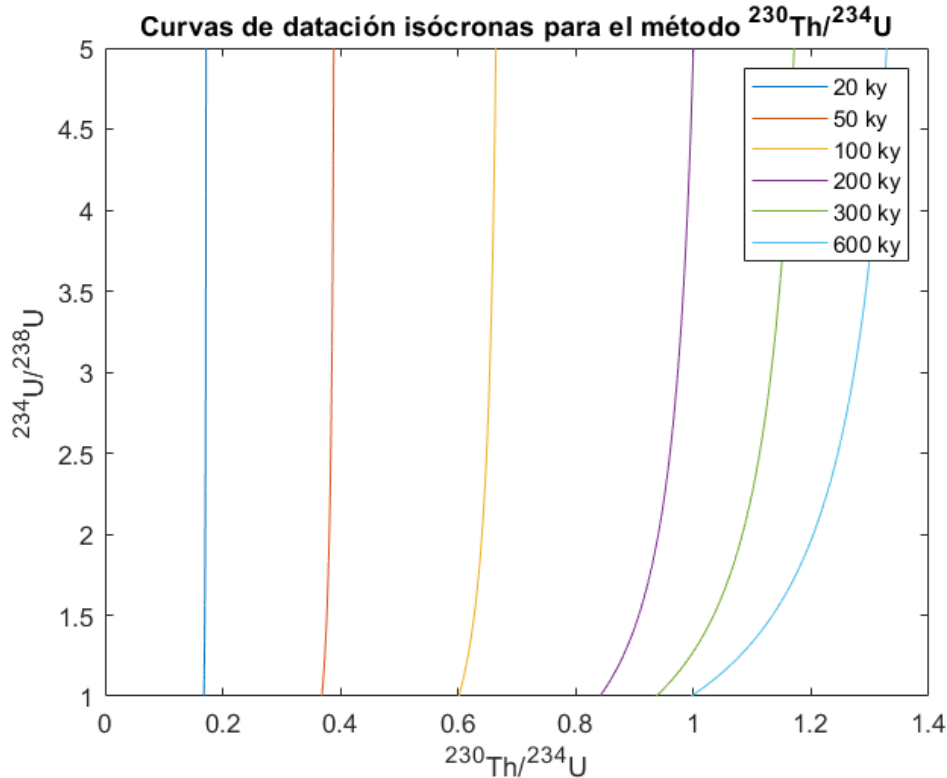


Figura 7. Curvas de datación para el método  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  para diferentes edades de la muestra entre los veinte mil y los seiscientos mil años.

Por otro lado, si el espécimen presenta un valor de  $R(t) = 1$ , o, de forma más general,  $T(t)$  es independiente de  $R(t)$ , por ejemplo, para antigüedades entorno y por debajo de los veinte mil años, la ecuación (18) se reduce a

$$T(t) = 1 - e^{-\lambda_0 t} [12] - [14]. \quad (19)$$

#### 2.4. Datación de sedimentos a partir de su contenido en $^{210}\text{Pb}$ .

El  $^{210}\text{Pb}$  es un radioisótopo perteneciente a la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$ , por lo que reside en el medio ambiente de forma natural. Entre su ascendencia se encuentra el  $^{222}\text{Rn}$ , un gas noble capaz de escapar de la corteza terrestre a la atmósfera y depositar sus descendientes en superficies alejadas de los terrenos en los que se generó. En particular, es de gran interés el flujo de  $^{210}\text{Pb}$  que se incorpora a lechos lacustres y marinos a lo largo de su proceso de formación, pues su estudio permite efectuar la datación de dichos sedimentos. Así, se pueden identificar antigüedades de hasta unos doscientos años.

Para la evaluación de este método, hay que tener en cuenta que una parte del plomo radiactivo que contienen las muestras se debe al decaimiento del  $^{238}\text{U}$  oriundo del mismo fondo acuático. De este modo, podemos distinguir entre  $^{210}\text{Pb}$  asistido, en equilibrio secular con el  $^{226}\text{Ra}$  del espécimen, es decir,

$$A_{\text{Pb,asistido}} = A_{\text{Ra}}, \quad (20)$$

y  $^{210}\text{Pb}$  en exceso, procedente del  $^{222}\text{Rn}$  atmosférico, que es el que nos interesa para realizar los cálculos de datación. En la práctica, la porción de estrato extraída es dividida en diferentes secciones con un grosor de un centímetro, habitualmente. A continuación, se miden la masa seca, la actividad de  $^{210}\text{Pb}$  y la de  $^{226}\text{Ra}$  en cada una de ellas, obteniendo la tasa de desintegración del plomo no sostenido mediante

$$A_{\text{Pb,exceso}} = A_{\text{Pb,total}} - A_{\text{Ra}}. \quad (21)$$

Además, las condiciones ambientales a las que haya sido sometido el material analizado durante su proceso de generación pueden ser muy variadas. De esta forma, se deben tener en cuenta el comportamiento temporal de distintas magnitudes (flujo atmosférico de  $^{210}\text{Pb}$  o tasa de acumulación de masa), el efecto de agentes externos (erosión superficial, la existencia de fuentes de radioisótopos, incorporación de restos orgánicos) y la redistribución interna de las sustancias que componen el sedimento por efectos gravitatorios o de difusión. El conocimiento de todos estos elementos permite elaborar modelos matemáticos con los que poder estimar la edad de cada porción del espécimen. Aquí vamos a tratar algunas de las estrategias más simples, todas ellas fundadas a partir de una expresión inicial común que relaciona las magnitudes fundamentales y tiene la forma



$$C = \frac{f}{r} e^{-\lambda \frac{m}{r}}, \quad (22)$$

con la condición inicial

$$C(t = 0) = \frac{f}{r}. \quad (23)$$

En ella,  $C$  es la concentración de actividad de  $^{210}\text{Pb}$  en exceso,  $f$ , el flujo atmosférico de actividad,  $r$ , la tasa de acumulación de masa,  $\lambda$ , la constante de desintegración del  $^{210}\text{Pb}$ , y  $m$ , la profundidad en masa. Más adelante describiremos cada uno de los modelos introducidos en la herramienta informática, pero, primero, explicaremos la notación empleada y algunas relaciones fundamentales, ya que presenta cierta complejidad. Se trata de la utilizada en el documento Radiocronología de sedimentos costeros utilizando  $^{210}\text{Pb}$ : modelos, validación y aplicaciones, emitido por la IAEA (International Atomic Energy Agency) en 2008 [15], [16].

#### 2.4.1. Notación y relaciones fundamentales.

Organizaremos los detalles sobre la notación por magnitudes, aunque comenzaremos con unas ideas generales que afectarán a todas ellas. Emplearemos el subíndice  $i$  para denotar variables asociadas a secciones, mientras que el añadido ( $i$ ) hará referencia a capas. Cabe mencionar que las secciones comienzan a numerarse desde 1 y las capas entre las que se encuentran, desde 0, empezando por la más superficial en ambos casos.

- Tiempo.

- $t(i)$ : edad de la capa  $i$ -ésima (y), con

$$t(0) = 0 \text{ y.} \quad (24)$$

- $t_i$ : edad media de la sección  $i$ -ésima (y).

$$t_i = \frac{t(i+1) + t(i)}{2}. \quad (25)$$

- $\Delta t_i$ : tiempo de formación de la sección  $i$ -ésima (y).

$$\Delta t_i = t(i+1) - t(i). \quad (26)$$

- $T_i$ : año medio de formación de la sección  $i$ -ésima (y). Dada la fecha de muestreo,  $F$ ,

$$T_i = F - t_i. \quad (27)$$

- $T(i)$ : año de formación de la capa  $i$ -ésima (y). Dada la fecha de muestreo,  $F$ ,

$$T(i) = F - t(i). \quad (28)$$

- Longitud.

- $L$ : profundidad total del sedimento (cm).
- $d$ : diámetro interno del sedimento (cm).

- $z(i)$ : profundidad de la capa  $i$ -ésima (cm).
- $z_i$ : profundidad media de la sección  $i$ -ésima (cm).

$$z_i = \frac{z(i+1) + z(i)}{2}. \quad (29)$$

- $\Delta z_i$ : grosor de la sección  $i$ -ésima (cm).

$$\Delta z_i = z(i+1) - z(i). \quad (30)$$

- Superficie.

- $S$ : superficie transversal del sedimento (cm<sup>2</sup>).

$$S = \pi \left( \frac{d}{2} \right)^2. \quad (31)$$

- Masa y profundidad en masa.

- $\Delta m_i$ : masa seca de la sección  $i$ -ésima (g).
- $m(i)$ : profundidad en masa de la capa  $i$ -ésima  $\left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2} \right)$ .

$$m(i) = \frac{\sum_{j=1}^i \Delta m_j}{S}, i \neq 0; m(0) = 0 \frac{\text{g}}{\text{cm}^2}. \quad (32)$$

- $m_i$ : profundidad en masa media de la sección  $i$ -ésima  $\left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2} \right)$ .

$$m_i = \frac{m(i+1) + m(i)}{2}. \quad (33)$$

- Actividad.

- $\Delta A_i$ : actividad de <sup>210</sup>Pb en exceso en la sección  $i$ -ésima (Bq).
- $A(i)$ : depósito de actividad de <sup>210</sup>Pb en exceso bajo la capa  $i$ -ésima  $\left( \frac{\text{Bq}}{\text{cm}^2} \right)$ . Para un ejemplar de  $n$  capas,

$$A(i) = \frac{\sum_{j=i}^n \Delta A_j}{S}, i \neq n; A(n) = 0 \frac{\text{Bq}}{\text{cm}^2}. \quad (34)$$

- Concentración de actividad.

- $C_i$ : concentración de actividad en la sección  $i$ -ésima  $\left( \frac{\text{Bq}}{\text{g}} \right)$ .

$$C_i = \frac{\Delta A_i}{\Delta m_i}. \quad (35)$$

- $C(i)$ : concentración de actividad correspondiente a la capa  $i$ -ésima  $\left( \frac{\text{Bq}}{\text{g}} \right)$ . Para una muestra de  $n$  capas.

$$C(i) = \frac{C_{i+1} + C_i}{2}, i \neq 0, n; C(n) = \frac{C_n}{2}; C(0) = 2C_1 - C(1). \quad (36)$$

- Flujo atmosférico de actividad.

- $f_i$ : flujo atmosférico de actividad medio durante la formación de la sección  $i$ -ésima  $\left(\frac{\text{Bq}}{\text{cm}^2\text{y}}\right)$ .

$$f = C(t = 0)r. \quad (37)$$

- Tasa de acumulación de masa.

- $r_i$ : tasa de acumulación de masa media durante la formación de la sección  $i$ -ésima  $\left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^2\text{y}}\right)$ .

$$r_i = \frac{m(i + 1) - m(i)}{\Delta t}. \quad (38)$$

- Tasa de acumulación del sedimento.

- $s_i$ : tasa de acumulación del sedimento media durante la formación de la sección  $i$ -ésima  $\left(\frac{\text{cm}}{\text{y}}\right)$ .

$$s_i = \frac{\Delta z_i}{\Delta t_i} [15], [17]. \quad (39)$$

#### 2.4.2. Modelos.

Una vez clarificada la notación que vamos a seguir, ya podemos centrarnos en los métodos de datación. Estos se apoyan en la relación (22) y se diferencian en las condiciones que les dan nombre y que afectan a tres de las magnitudes presentes en dicha ecuación: concentración de actividad, flujo de actividad y tasa de acumulación de masa.

##### 2.4.2.1. CA (Constant Activity) o CIC (Constant Initial Concentration).

La premisa del modelo CA es que la concentración de actividad inicial es constante y uniforme en cada capa de sedimento, por lo que esperamos un decrecimiento monótono y exponencial de la concentración con el aumento en la profundidad. Esto implica que  $f$  y  $r$  deben mantenerse inversamente proporcionales durante todo el periodo de formación del sustrato. La concentración inicial puede ser medida directamente empleando trampas de materiales que recojan el contenido correspondiente a la capa superior, pero esto es muy complicado de realizar. Normalmente, se requiere que la concentración de actividad se comporte, al menos para las secciones más superficiales, de forma exponencial con respecto a la profundidad en masa. Consecuentemente, la tasa de acumulación de masa en ese tramo debe suponerse constante. Así, la concentración inicial se calcula efectuando una regresión lineal del  $\ln(C_i)$  en función de  $m_i$  según la recta

$$\ln(C_i) = \ln(C(0)) - \lambda \frac{m_i}{r_i}, \quad (40)$$

a partir de la ordenada en el origen,  $a = \ln(C(0))$ , como

$$C(0) = e^a. \quad (41)$$

Por otra parte, las tasas de acumulación de masa y del sedimento se extraen de las expresiones (38) y (39), respectivamente, y el flujo se consigue de (37). Finalmente, las edades de las secciones se evalúan a través de la operación

$$t_i = \frac{\ln\left(\frac{C(0)}{C_i}\right)}{\lambda} [15]- [17]. \quad (42)$$

#### 2.4.2.2. CS (Constant Sedimentation).

La teoría de CS se basa en considerar que la tasa de acumulación de masa ha permanecido constante mientras se formaba el sedimento. Esta es una condición muy exigente y muy poco utilizada para analizar casos reales. En principio, es aplicable si se conoce la antigüedad del alguna de las secciones del sedimento, por ejemplo, por su elevado contenido en alguna sustancia o elemento, como puede ser el  $^{137}\text{Cs}$ , que fue liberado en grandes cantidades a la atmósfera con los ensayos nucleares en 1963 y el accidente de Chernóbil en 1986. Sin embargo, esto solo se puede usar en algunas zonas del hemisferio norte. De otro modo, se deben registrar los valores del flujo de actividad correspondientes a cada sección, que es una tarea rara vez practicable.

Por lo tanto, siguiendo la estrategia de la fecha conocida para la sección  $k$ -ésima, podemos calcular la tasa de acumulación de masa como

$$r = \frac{m_i}{\tilde{t}}, \quad (43)$$

donde  $\tilde{t}$  es el tiempo transcurrido entre el evento asociado a la porción de sustrato y el día de muestreo. Después, el flujo se calcula despejándolo de (22) y la tasa de sedimentación con (39). Por último, las edades se obtienen con

$$t_i = \frac{m_i}{r} [15]- [17]. \quad (44)$$

#### 2.4.2.3. CF (Constant Flux) o CRS (Constant Rate of Supply).

La estrategia de CF consiste en considerar que el flujo de actividad se mantiene constante a lo largo del tiempo de generación del sedimento. En este caso, en lugar de concentraciones, se trabaja con depósitos de actividad, cuya evolución es análoga a la de la otra, es decir,

$$A(i) = A(0)e^{-\lambda t} \quad (45)$$

Partimos de la ecuación que relaciona estas dos magnitudes

$$A(0) = \int_0^{+\infty} C dm. \quad (46)$$

Combinándola ahora con (22) y

$$r = \frac{dm}{dt}, \quad (47)$$

y resolviendo la integral, llegamos a

$$A(0) = \int_0^{+\infty} \frac{f}{r} e^{-\lambda t} dm = f \int_0^{+\infty} e^{-\lambda t} dt = \frac{f}{\lambda}, \quad (48)$$

de donde se obtiene el flujo de actividad de forma directa si se conoce el depósito completo. Por otro lado, si la reserva está incompleta debido, por ejemplo, al tamaño finito de la muestra, esta debe estimarse y hay dos métodos que se pueden usar para ello. En primer lugar, de un modo similar al que comentamos para el modelo CS, es factible asociar una fecha de referencia directamente con una de las capas del espécimen. Así, si tenemos definido el año de origen de la lámina  $j$ -ésima, el depósito por encima de ese plano es

$$\delta A = A(0) - A(j), \quad (49)$$

que, junto a la ecuación (45), lleva a

$$A(j) = \frac{\delta A}{e^{\lambda t} - 1}. \quad (50)$$

La otra posibilidad implica el tener registrado el valor de la tasa de acumulación de masa, al menos, para la sección más profunda de la muestra. Ahora, la acumulación de actividad bajo la capa  $j$ -ésima es

$$A(j) = \frac{rC(j)}{\lambda}. \quad (51)$$

A continuación, la tasa de acumulación de masa se estima, para cada sección, a partir de

$$r_i = \frac{A(i)\lambda}{C_i}, \quad (52)$$

salvo cuando el flujo presenta variaciones periódicas, frecuentemente, anuales, circunstancias bajo las que se emplea la expresión

$$r_i = \frac{A(i)}{\Delta t_i C_i} (1 - e^{-\lambda t_i}). \quad (53)$$

Para concluir, la datación se efectúa para cada capa despejando de (45) con

$$t(i) = \frac{\ln\left(\frac{A(0)}{A(i)}\right)}{\lambda} [15]- [17]. \quad (54)$$

#### 2.4.2.4. CFCS (Constant Flux Constant Sedimentation).

El modelo CFCS exige que tanto el flujo de actividad como la tasa de acumulación de masa permanezcan constantes durante el periodo de formación del sedimento, lo que implica que la concentración inicial también lo sea, según la ecuación (23). Una condición más laxa es

que esto se cumpla a tramos dentro de la muestra, lo que hace que el método sea más aplicable a estudios reales. Primero, se utilizan las expresiones (40) y (41) para obtener la concentración inicial para cada porción lineal del ejemplar analizado. Después, la tasa de acumulación de masa se calcula a partir de la pendiente,  $b = \frac{\lambda m_i}{r}$ , de las rectas de ajuste como

$$r = \frac{\lambda m_i}{b}, \quad (55)$$

y el flujo de actividad se consigue despejando de (23). Finalmente, la edad de cada capa y sección se resuelve con los tiempos de formación de estas últimas

$$\Delta t_i = \frac{\Delta m_i}{Sr} [15]- [17]. \quad (56)$$

3. Desarrollo de una aplicación informática para el estudio de las series radiactivas y cálculos de datación. RULES: RaPCUBES (Radioactivity and Population Calculator Using Bateman Equations' Solutions), URADS (Uranium Routines Application for Dating Samples) and LEADS (Lead Employed Approaches for Dating Sediments) Encompassed Software.

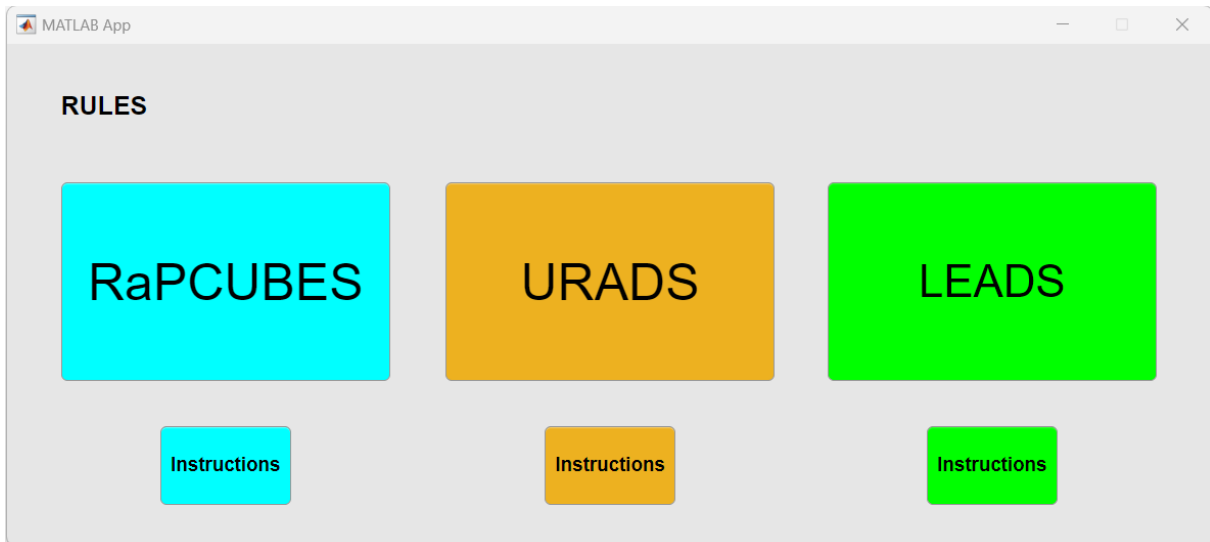
La herramienta RULES ha sido desarrollada en el entorno de programación de la utilidad App Designer proporcionada por MATLAB. Para poder acceder a ella, debe descargarse una carpeta homónima que se subirá a una determinada plataforma en la fecha de publicación oficial. En esta se incluirán los archivos que aparecen en la *Figura 8*. Primero, encontraremos una carpeta en la que se recogen las instrucciones de uso de los diferentes programas que contiene. Después, el archivo “readme.txt” indica que, aunque MATLAB es un software de pago, para poder utilizar esta aplicación de escritorio solo hace falta tener descargada en el ordenador la versión 9.11 (R2021b) del motor de ejecución Runtime, que está disponible de forma gratuita en la página oficial del proveedor. Debajo, se encuentra el documento “.exe” que inicializa el programa. Finalmente, se incorpora de forma automática el logo de la herramienta, que cubre la pantalla de carga de la aplicación.

Nombre	Fecha de modificación	Tipo	Tamaño
Instructions	30/05/2023 23:10	Carpeta de archivos	
readme.txt	30/05/2023 23:09	Documento de tex...	2 KB
RULES.exe	30/05/2023 23:09	Aplicación	4.661 KB
splash.png	23/02/2022 17:03	Archivo PNG	79 KB

Figura 8. Archivos contenidos en la carpeta de instalación de la herramienta RULES.

RULES un software interactivo que da acceso a cada una de las tres aplicaciones que se incluyen en él y a las instrucciones de uso para cada una de ellas. Esto lo podemos lograr, simplemente, haciendo clic con el cursor en el recuadro correspondiente de los que vemos en la *Figura 9*, donde se muestra la interfaz principal de la herramienta.

La primera de las aplicaciones, RaPCUBES, permite calcular poblaciones y actividades de los radionúclidos pertenecientes a una misma familia radiactiva, que puede ser una de las naturales ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$  y  $^{235}\text{U}$ ) o la del  $^{237}\text{Np}$ . La siguiente, URADS, está dedicada al cálculo de edades de muestras geológicas por los métodos de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ , basados en desequilibrios entre radioisótopos pertenecientes a la serie del  $^{238}\text{U}$ . Finalmente, LEADS es un instrumento que se centra en la datación de sedimentos siguiendo las principales estrategias relacionadas con el  $^{210}\text{Pb}$ .



*Figura 9. Interfaz de usuario de la aplicación RULES, que da acceso a las herramientas RaPCUBES, URADS y LEADS, y a las instrucciones de uso de cada una de ellas.*

A continuación, explicaremos cómo hacer uso de cada una de las calculadoras mencionadas, al mismo tiempo que vamos recorriendo su interfaz de usuario. Además, daremos algunas notas acerca de la programación que hay detrás de ellas, sobre todo en lo relacionado con la adaptación de las ecuaciones vistas a lo largo del documento a lenguaje informático. Asimismo, comentaremos brevemente la estructura de las bases de datos, construidas en Excel para facilitar su edición y actualización por cualquier usuario sin necesidad de acceder al código, en caso de publicar una versión abierta de la herramienta.

### 3.1. RaPCUBES: Radioactivity and Population Calculator Using Bateman Equations' Solutions.

RaPCUBES es una aplicación informática dedicada al estudio de las series radiactivas naturales ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$  y  $^{235}\text{U}$ ) y la del  $^{237}\text{Np}$ . Concretamente, hay un par de condiciones bajo las

que trabaja nuestro programa y deben ser consideradas siempre por el usuario. Primero, los sistemas que puede analizar deben estar compuestos, inicialmente, por un solo radioisótopo, perteneciente a una de las familias radiactivas mencionadas. Además, la muestra debe haber permanecido físicamente aislada del exterior desde ese mismo instante, de modo que la única causa de variación en las poblaciones de núcleos es la desintegración de los elementos de la cadena analizada.

### 3.1.1. Base de datos.

La base de datos de RaPCUBES incluye toda la información relativa a cada una de las series radiactivas con las que permite trabajar. De hecho, efectuando las modificaciones pertinentes, se podría añadir cualquier otra cadena de decaimiento para poder estudiarla con la herramienta, sin necesidad de alterar el código del programa.

En primer lugar, un archivo recoge el nombre de los radionúclidos que encabezan las distintas familias radiactivas en una columna, según el formato “especie atómica-número másico”, como vemos en la *Figura 10*. Después, para cada una de las series podemos encontrar un documento específico en el que los datos de importancia se organizan en tres fichas diferentes. Tomemos como ejemplo el correspondiente al  $^{237}\text{Np}$ . En la página principal, mostrada en la *Figura 11*, encontramos cinco columnas que contienen la lista de radionúclidos ordenados por generaciones, que se indican a la derecha del todo, sus semividas, los errores absolutos de estas y la unidad en la que están expresadas. Se incluye el último elemento de cada serie, que es estable, por lo que su semivida tendría un valor infinito y no nulo, como hemos establecido. Sin embargo, esto resulta de mayor utilidad para la lectura posterior de la información con MATLAB. Con respecto a la hoja denominada “Probabilities”, presentada en la *Figura 12*, se compone de una matriz en la que cada valor es el factor de intensidad que relaciona el núcleo padre, al que corresponde una columna, con sus hijos, organizados en filas. Este factor será nulo si no hay ninguna relación de parentesco, uno si el hijo es único e intermedio si existe una bifurcación de la cadena. Finalmente, en la última ficha, “Branches”, se ordenan los diferentes caminos de desintegración posibles desde el isótopo primigenio hasta el estable. Los números que observamos en la *Figura 13* se refieren al orden en el que aparece cada radionúclido en la primera columna de la tabla de la *Figura 10*.

	A
1	Nucleus_parent_name
2	Np-237
3	Th-232
4	U-235
5	U-238

*Figura 10.* Documento .xlsx de la base de datos de RaPCUBES que recoge el nombre de las series radiactivas que se pueden estudiar con la aplicación.



	A	B	C	D	E
1	Nucleus	Half_life	Error	Unit	Generation
2	Np-237	2.14E+06	7.00E+03	y	1
3	Pa-233	26.975	1.30E-02	d	2
4	U-233	1.59E+05	2.00E+02	y	3
5	Th-229	7.93E+03	2.80E+01	y	4
6	Ra-225	1.49E+01	2.00E-01	d	5
7	Ac-225	9.92	0.003	d	6
8	Fr-221	286.1	1.00E+00	s	7
9	Ra-221	28	2	s	8
10	At-217	3.23E-02	4.00E-04	s	8
11	Rn-217	5.40E-04	5.00E-05	s	9
12	Bi-213	45.61	6.00E-02	m	9
13	Po-213	3.72E-06	2.00E-08	s	10
14	Tl-209	2.16E+00	7.00E-03	m	10
15	Pb-209	3.234	0.007	h	11
16	Bi-209	2.01E+19	8.00E+17	y	12
17	Tl-205	0	0	s	13

Figura 11. Página principal de la base de datos para la serie radiactiva del  $^{237}\text{Np}$ . Contiene los nombres de los radionúclidos que componen la familia, sus semividas, las incertidumbres correspondientes y la unidad en que están expresadas, y la generación a la que pertenecen dentro de la cadena.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
1	Daughters	Np-237	Pa-233	U-233	Th-229	Ra-225	Ac-225	Fr-221	Ra-221	At-217	Rn-217	Bi-213	Po-213	Tl-209	Pb-209	Bi-209	Tl-205
2	Np-237	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	Pa-233	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	U-233	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	Th-229	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	Ra-225	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	Ac-225	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	Fr-221	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	Ra-221	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	At-217	0	0	0	0	0	0	0.9999	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	Rn-217	0	0	0	0	0	0	0	1	0.00007	0	0	0	0	0	0	0
12	Bi-213	0	0	0	0	0	0	0	0	0.99993	0	0	0	0	0	0	0
13	Po-213	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0.978	0	0	0	0	0
14	Tl-209	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.022	0	0	0	0	0
15	Pb-209	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
16	Bi-209	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
17	Tl-205	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0

Figura 12. Página de la base de datos correspondiente a la serie del  $^{237}\text{Np}$  que recoge los valores de los factores de intensidad entre padres, que encabezan columnas, e hijos, relacionados con filas.

	A	B	C	D
1	Branch_1	Branch_2	Branch_3	Branch_4
2	1	1	1	1
3	2	2	2	2
4	3	3	3	3
5	4	4	4	4
6	5	5	5	5
7	6	6	6	6
8	7	7	7	7
9	8	9	9	9
10	10	10	11	11
11	12	12	12	13
12	14	14	14	14
13	15	15	15	15
14	16	16	16	16

Figura 13. Página de la base de datos correspondiente a la serie del  $^{237}\text{Np}$  que recoge los diferentes caminos de desintegración posibles desde el radionúclido primigenio hasta la estabilidad. Los valores numéricos se corresponden con la posición de cada núcleo en la primera ficha del documento de Excel.

Por otro lado, creamos una carpeta con las imágenes de las que hará uso la aplicación. En este caso, una de ellas muestra las direcciones de los decaimientos alfa y beta con flechas perpendiculares que apuntan hacia abajo y hacia la derecha, respectivamente, como vemos en la Figura 14. El resto de ilustraciones presentan los diagramas de desintegración de las distintas familias radiactivas, con un aspecto equivalente a las del apartado 2.2.

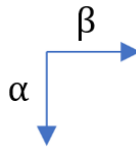


Figura 14. Imagen indicativa del tipo de desintegración radiactiva, alfa o beta, correspondiente con cada orientación posible de la flecha.

### 3.1.2. Interfaz de usuario e instrucciones de uso.

La interfaz de usuario de RaPCUBES está etiquetada y estructurada para que sea lo más intuitiva posible. Su aspecto es el que se muestra en la *Figura 15*, donde se ha introducido cierta información a modo de ejemplo para poder visualizar el comportamiento de cada una de las partes en las que podemos dividirla.

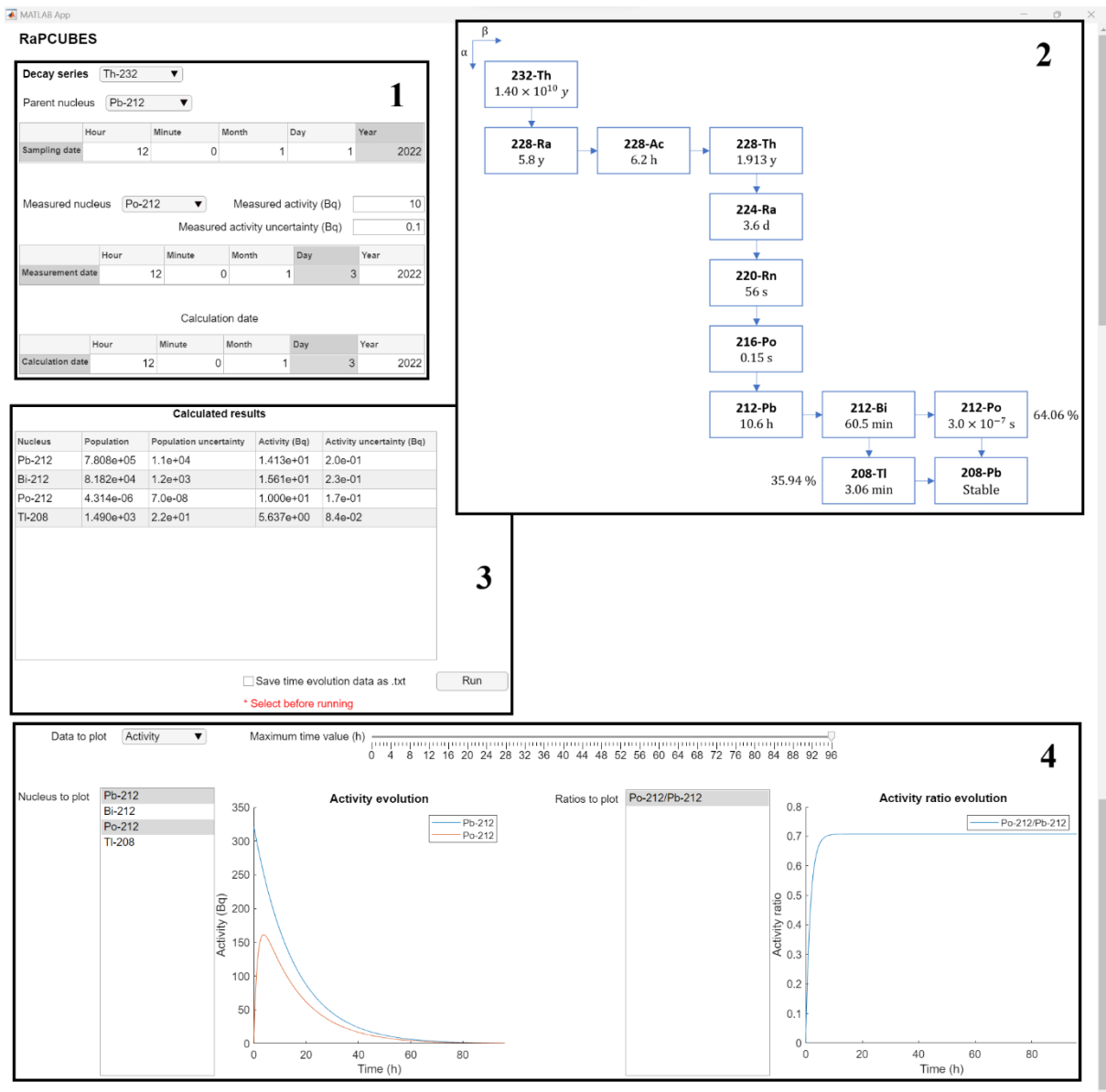


Figura 15. Interfaz completa de RaPCUBES con las diferentes secciones indicadas. 1. Datos de entrada de la aplicación. 2. Esquema de desintegración de la serie radiactiva seleccionada. 3. Resultados instantáneos, opción de guardar los valores de evolución temporal como archivo de texto y botón que ejecuta la calculadora. 4. Apartado gráfico para representar la evolución temporal de poblaciones, actividades y cocientes correspondientes.

La parte **1**, ampliada en la *Figura 16* y situada en la esquina superior izquierda de la interfaz, es la relacionada con la entrada de datos por parte del usuario, y es la primera en la que debe fijarse para interactuar. Al comienzo, hay que especificar la serie radiactiva con la que se quiere trabajar de entre las disponibles en el desplegable “Decay series”, con lo que aparecerá la imagen del esquema de desintegración de la familia en **2**. A continuación, seleccionamos el único radionúclido del que hay población inicialmente en la muestra que vamos a analizar en “Parent nucleus” e indicamos la fecha de colección del espécimen en la tabla “Sampling date”. Después, elegimos el radioisótopo del que hemos medido la actividad en el apartado “Measured nucleus”, el valor de esta Bq en “Measured activity (Bq)”, su incertidumbre en términos absolutos en “Measured activity uncertainty (Bq)” y el instante en el que se efectuó en la tabla “Measurement date”. Este debe ser posterior a la fecha de muestreo, salvo si el núcleo medido y el primitivo de la muestra coinciden. Para acabar, tendremos que definir, en la tabla “Calculation date”, un momento, localizado también tras la colección, para el que queremos que la aplicación obtenga los valores instantáneos de actividad y población de cada uno de los isótopos presentes en el sistema.

Decay series

Parent nucleus

	Hour	Minute	Month	Day	Year
Sampling date	12	0	1	1	2022

Measured nucleus  Measured activity (Bq)

Measured activity uncertainty (Bq)

	Hour	Minute	Month	Day	Year
Measurement date	12	0	1	3	2022

Calculation date

	Hour	Minute	Month	Day	Year
Calculation date	12	0	1	3	2022

*Figura 16. Datos de entrada para RaPCUBES.*

Una vez introducida toda la información relevante, ya nos podemos dirigir a la zona número **3**, ampliada en la *Figura 17*. Allí, decidiremos primero si queremos o no guardar los cálculos de evolución temporal para poblaciones y actividades en dos archivos de texto, clicando o no en la casilla “Save time evolution data as .txt”. Después, pulsaremos el botón “Run”, con el que se ejecutará la calculadora del programa si los datos de entrada cumplen las condiciones de funcionamiento de la aplicación. En caso contrario, se generará una ventana

emergente en la que se comentarán los distintos apartados que necesitan revisión. Cuando finalicen las operaciones, algo que ocurrirá de forma casi instantánea, se mostrarán los valores de poblaciones y actividades de cada uno de los radionúclidos que forman parte de la muestra en la tabla “Calculated results”, para el instante definido en “Calculation date”. Con este fin, hay que calcular, primero, la población inicial del núcleo padre a partir de

$$N_1(0) = \sum_{\text{caminos de desintegración}} \frac{A_n(t_{\text{medida}})}{\prod_{i=1}^n \lambda_i \left( \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\lambda_k t_{\text{medida}}}}{\prod_{j=1, j \neq k}^n (\lambda_j - \lambda_k)} \right)}, n \neq 1, \quad (57)$$

$$N_1(0) = \frac{A_1(t_{\text{medida}})}{\lambda_1}, n = 1,$$

con  $A_n$ , la actividad del radionúclido medido, y  $t_{\text{medida}}$ , la diferencia de tiempo entre la fecha de muestreo y la de medida. Desde aquí, se pueden obtener las poblaciones de todos los radioisótopos en el momento de cálculo indicado como

$$N_n(t_{\text{cálculo}}) = N_1(0) \sum_{\text{caminos de desintegración}} \left[ \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \left( \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\lambda_k t_{\text{cálculo}}}}{\prod_{j=1, j \neq k}^n (\lambda_j - \lambda_k)} \right) \right], n \neq 1 \quad (58)$$

$$N_1(t_{\text{cálculo}}) = N_1(0) e^{-\lambda_1 t_{\text{cálculo}}}, n = 1,$$

donde  $t_{\text{cálculo}}$  es el intervalo temporal transcurrido entre las fechas de muestreo y cálculo. Asimismo, considera las diferentes ramificaciones de la cadena de desintegraciones para la expresión (4). Por su parte, las actividades se obtienen con (5). También se incluye el error absoluto de cada resultado, deducido por medio de la propagación cuadrática media, que para una función de  $m$  variables,  $f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ , tiene la forma

$$\Delta f(x_1, \dots, x_m) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \Delta x_i \right)^2}. \quad (59)$$

Con respecto a los cálculos de evolución temporal de las magnitudes, el programa crea un vector de tiempos de diez mil componentes que abarca desde la fecha de muestreo hasta dos veces el tiempo de cálculo,  $\overrightarrow{t_{\text{cálculo}}}$ . Ahora, las ecuaciones empleadas son

$$\overrightarrow{N_n(t)} = N_1(0) \sum_{\text{caminos de desintegración}} \left[ \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \left( \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\lambda_k \overrightarrow{t_{\text{cálculo}}}}}{\prod_{j=1, j \neq k}^n (\lambda_j - \lambda_k)} \right) \right] \quad (60)$$

y

$$\overrightarrow{A_n(t)} = \lambda_n \overrightarrow{N_n(t)}. \quad (61)$$

### Calculated results

Nucleus	Population	Population uncertainty	Activity (Bq)	Activity uncertainty (Bq)
Pb-212	7.808e+05	1.1e+04	1.413e+01	2.0e-01
Bi-212	8.182e+04	1.2e+03	1.561e+01	2.3e-01
Po-212	4.314e-06	7.0e-08	1.000e+01	1.7e-01
Tl-208	1.490e+03	2.2e+01	5.637e+00	8.4e-02

Save time evolution data as .txt

Run

\* Select before running

Figura 17. Tabla de resultados instantáneos obtenidos en la fecha de cálculo, opción de guardar los datos de evolución temporal de poblaciones y actividades como archivos de texto, y botón que ejecuta la calculadora.

Finalmente, podemos utilizar el apartado gráfico para la visualización de resultados en la propia interfaz de la herramienta, acudiendo a la zona **4**, situada en la mitad inferior de la pantalla. Allí, podemos seleccionar qué magnitud representar en el desplegable “Data to plot”. Después, elegiremos hasta tres radioisótopos de la lista “Nucleus to plot” mientras pulsamos la tecla “ctrl”. A medida que lo hagamos, irán apareciendo las curvas pertinentes en los ejes adyacentes, y los cocientes correspondientes en “Ratios to plot”, que también podremos visualizar a su derecha. Además, existe un elemento deslizable sobre las gráficas, llamado “Maximum time value”, que permite acortar la longitud de los ejes temporales para observar detalles del comportamiento cuando la muestra es relativamente joven. Por último, cabe destacar que cada gráfica posee un pequeño menú en su esquina superior derecha que da diferentes opciones básicas para manipular la representación in situ, como el zoom, y guardarla como imagen.

### 3.2. URADS: Uranium Routines Application for Dating Samples.

URADS es una utilidad centrada en la datación de muestras geológicas por los métodos de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ . Adicionalmente, para este último consideraremos las posibilidades de que dependa o no del cociente anterior. Asimismo, el programa será útil para estudiar muestras que hayan permanecido imperturbables desde que se produjo el fenómeno que se quiere datar y, para  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ , considerará que, originalmente, el espécimen carece de torio.

#### 3.2.1. Base de datos.

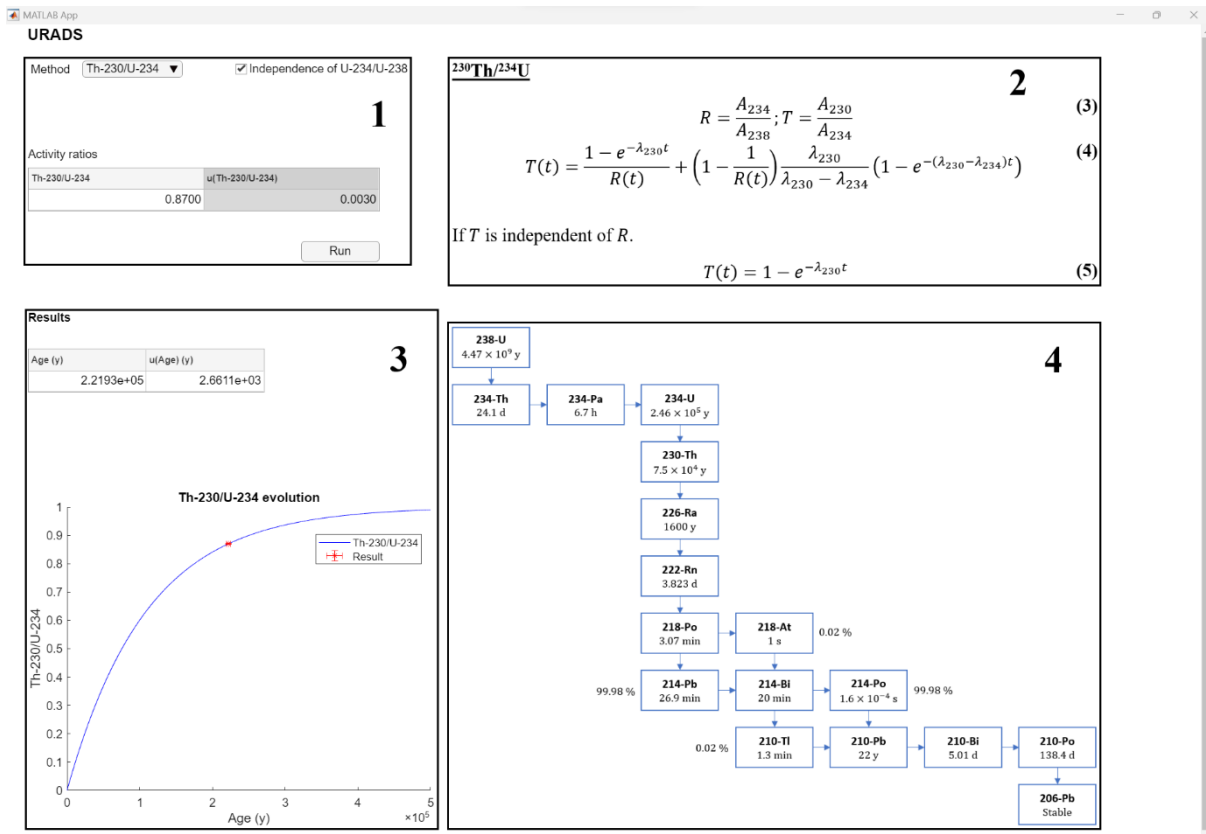
La base de datos elaborada para URADS tiene un aspecto similar a la de la *Figura 11*, en la que se recogen las semividas, incertidumbres y sus unidades, de los radionúclidos de interés. En este caso, al tratarse de una aplicación con solo tres posibilidades entre las que puede

elegir el usuario, hemos optado por simplificar más la información almacenada a cambio de cargar algo más el código. Por ello, aquí no se pueden añadir elementos al documento Excel, pero sí modificar y actualizar la información que ya contiene.

Por otra parte, para esta aplicación la fuente de imágenes contiene 3 ilustraciones. Una se corresponde con la *Figura 3*, es decir, el esquema de desintegración de la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$ . Las demás llevan escritas las principales ecuaciones de cada uno de los modelos físicos.

### 3.2.2. Interfaz de usuario e instrucciones de uso.

La interfaz completa de URADS es la que visualizamos en la *Figura 18*. Para poder observar el funcionamiento de cada uno de sus elementos, hemos ejecutado el programa para un caso particular con determinados datos, bajo circunstancias concretas. También hemos dividido la pantalla en cuatro zonas claramente diferenciadas.



*Figura 18. Interfaz completa de URADS con las diferentes secciones indicadas. 1. Datos de entrada de la aplicación y botón de ejecución 2. Ecuaciones principales del método seleccionado. 3. Gráfica de localización de la medida con respecto a las curvas de referencia teóricas. 4. Esquema de desintegración de la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$ .*

Para comenzar, el usuario debe dirigirse al apartado **1**, situado en la parte superior izquierda, donde hay que rellenar los distintos campos de datos de entrada de la herramienta. Empezamos eligiendo uno de los dos métodos de los que disponemos en el desplegable “Method”. Al hacer esto, se mostrarán en la zona **2** las principales ecuaciones relacionadas. Si seleccionamos el de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ , la tabla “Activity ratios” tendrá el aspecto de la *Figura 19 (a)*,

donde, en concordancia con lo descrito en el punto 2.3.1, se piden los cocientes de actividades inicial y en algún instante conocido. Asimismo, se pueden incluir las incertidumbres estimadas para dichos valores. Por otro lado, con la estrategia basada en  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ , nos aparecerá un cuadro llamado “Independence of U-234/U-238” que podemos marcar o no en función de nuestras necesidades. En caso de dejarlo vacío, veremos lo mismo que en la *Figura 19 (b)*, de modo que, ahora, será obligado introducir medidas de ambas ratios, que hayan sido efectuadas de forma simultánea. La última posibilidad implica señalar el cuadrado interactivo indicado, con lo que se nos pedirá introducir, simplemente, la cantidad correspondiente a la razón de  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  que se ha medido.

Method U-234/U-238 ▼

Activity ratios

U-234/U-238	u(U-234/U-238)	U-234/U-238(0)	u(U-234/U-238(0))
0	0	0	0

(a)

Method Th-230/U-234 ▼

Independence of U-234/U-238

Activity ratios

Th-230/U-234	u(Th-230/U-234)	U-234/U-238	u(U-234/U-238)
0	0	0	0

(b)

Method Th-230/U-234 ▼

Independence of U-234/U-238

Activity ratios

Th-230/U-234	u(Th-230/U-234)
0.8700	0.0030

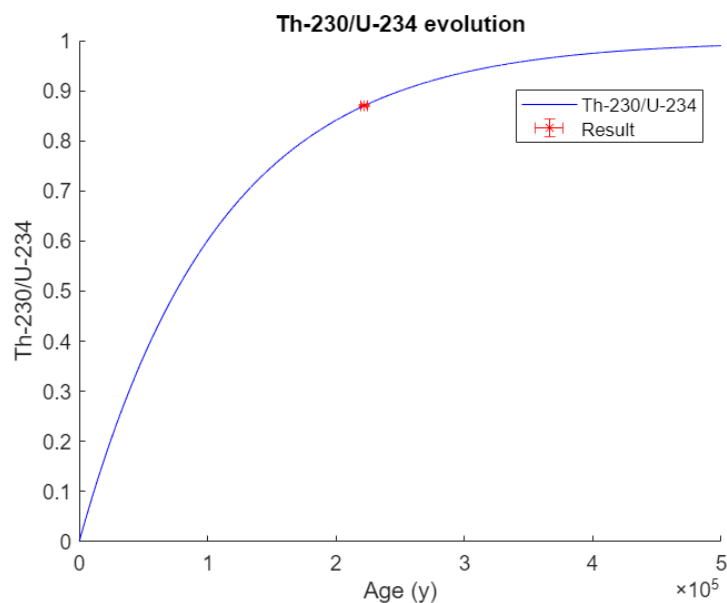
(c)

*Figura 19. Diferentes posibilidades de entrada de datos para la aplicación URADS, según las opciones elegidas. (a) Método  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ . (b) Método  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  con dependencia con respecto a  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ . (c) Método  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  con independencia con respecto a  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ .*

Una vez se han introducido todos los datos necesarios, podemos hacer clic en el botón “Run” para ejecutar la calculadora de datación. Si el programa encuentra alguna errata en la información de entrada, generará una ventana de alerta explicando el motivo de la incidencia. Cuando no ocurra esto, se mostrarán los resultados en los distintos campos del área **3**, ampliada en la *Figura 20*. La edad de la muestra junto con su incertidumbre, ambas expresadas en años, ocupan la tabla “Results”. La propagación de errores seguirá, en general, la forma de la expresión **(59)**, salvo para la situación en la que empleamos el método  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  con dependencia de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ , pues en la ecuación a resolver, la **(18)**, el tiempo aparece implícitamente y no se puede despejar. Para solucionar esta cuestión, la antigüedad la calculamos utilizando una función de MATLAB que encuentra raíces de funciones. Su incertidumbre la obtenemos a partir de las generadas por cada una de las variables de las que depende. Así, resolveremos de nuevo **(18)** dos veces por cada parámetro diferente al tiempo que participa en la expresión. En una utilizaremos el valor de esa magnitud menos el error absoluto que le corresponde y, en la otra, la cantidad medida más su incertidumbre, y efectuaremos la media de ambas. Finalmente, evaluaremos la raíz cuadrada de la suma de dichas medias elevadas a dos.

**Results**

Age (y)	u(Age) (y)
2.2193e+05	2.6611e+03



*Figura 20. Resultados calculados por URADS.*



Por otro lado, en la esquina inferior izquierda de la interfaz encontramos unos ejes en los que se representan las curvas de datación utilizadas junto al punto correspondiente a la o las medidas tomadas. Bajo las condiciones de método de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  con independencia del anterior, se dibujará la gráfica de evolución temporal de la ratio pertinente en función del tiempo, hasta un máximo de tres millones y quinientos mil años, respectivamente. En cambio, al trabajar con  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  dependiente de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ , se representarán distintas curvas de referencia del segundo frente al primero entre los veinte mil y seiscientos mil años, además de la correspondiente a la edad calculada y el punto relativo a los datos proporcionados, como se visualiza en la *Figura 21*.

Para concluir, en la sección 4 hallamos, en todo momento, el esquema de desintegración correspondiente a la serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$ , para poder consultarlo dentro de la interfaz siempre que queramos. Esto ganará importancia cuando se incluyan más métodos, de manera que puedan participar radionúclidos repartidos a lo largo de toda la cadena.

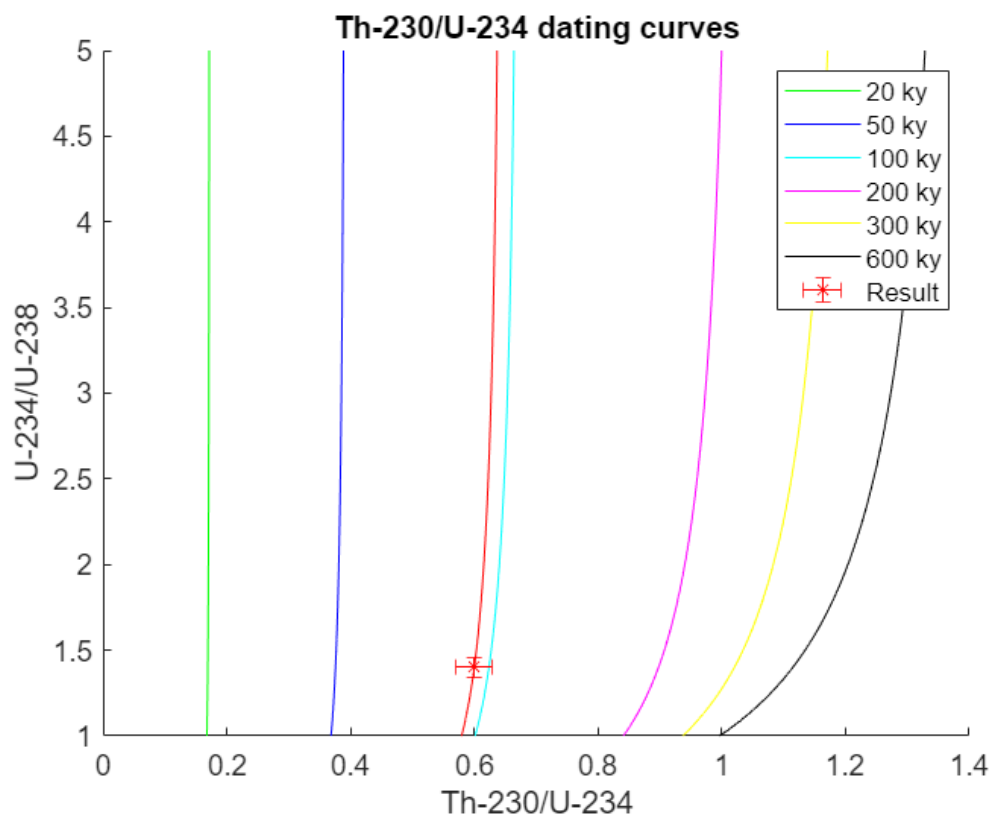


Figura 21. Curvas de datación por el método de  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  dependiente del cociente  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  junto con el resultado calculado por URADS.

### 3.3. LEADS: Lead Employed Approaches for Dating Sediments.

La aplicación LEADS está destinada a la datación de sedimentos lacustres y marinos por el método de  $^{210}\text{Pb}$ , e incluye los modelos matemáticos más básicos: CA, CS, CF y CFCS. Además, para cada uno de ellos el usuario podrá seleccionar entre diferentes posibilidades que

se adapten lo mejor posible a las condiciones bajo las que se originó la muestra analizada o a la información que se conoce de ella.

### 3.3.1. Base de datos.

La base de datos de LEADS consta de un solo documento de Excel compuesto por cinco fichas. La primera de ellas recoge los nombres de los cuatro modelos físicos con los que trabaja la aplicación, como se muestra en la *Figura 22*. Las restantes contienen toda la información relevante al respecto de cada una de estas estrategias. Por ejemplo, en la *Figura 23* encontramos la correspondiente a CA. Allí, las columnas de la mitad izquierda se refieren a capas, mientras que las de la derecha se relacionan con secciones. La información disponible, en todo caso, comienza con los parámetros relevantes que aparecerán en las tablas de la interfaz de la aplicación. Por otra parte, si el dato correspondiente debe poder ser editado por el usuario pondremos un uno en la columna siguiente, si no, un cero. Más adelante, especificaremos con qué eje, x o y, y qué nombre queremos que se identifique cada magnitud en la interfaz gráfica, marcando con guiones aquellas que no nos interese representar directamente, como las incertidumbres.

Con respecto a las imágenes, estas se almacenan en una carpeta aparte, son cuatro y contienen las principales ecuaciones de cada modelo físico.

	A
1	Models
2	CA
3	CS
4	CF
5	CFCS

*Figura 22. Ficha de la base de datos de LEADS que recoge los nombres de los diferentes modelos físicos con los que trabaja.*

	A	B	C	D	E	F	G	H
	Layers_Parameter	Editable_layers_parameters	Axis_layers	Title_layers	Sections_Parameters	Editable_sections_parameters	Axis_sections	Title_sections
2	Layer		0 -	-	Section		0 -	-
3	z(i) (cm)		0 x	depth	$\Delta z_i$ (cm)		1 -	-
4	u(z(i)) (cm)		0 -	-	u( $\Delta z_i$ ) (cm)		1 -	-
5	m(i) (g/cm <sup>2</sup> )		0 x	mass depth	$\Delta m_i$ (g)		1 -	-
6	u(m(i)) (g/cm <sup>2</sup> )		0 -	-	u( $\Delta m_i$ ) (g)		1 -	-
7	C(i) (Bq/g)		0 y	activity concentration	A_i 210-Pb (Bq)		1 -	-
8	u(C(i)) (Bq/g)		0 -	-	u(A_i 210-Pb) (Bq)		1 -	-
9	t(i) (y)		0 x	age	A_i 226-Ra (Bq)		1 -	-
10	u(t(i)) (y)		0 -	-	u(A_i 226-Ra) (Bq)		1 -	-
11	T(i) (y)		0 x	formation year	Linear correlation		1 -	-
12	u(T(i)) (y)		0 -	-	z_j (cm)		0 x	depth
13					u(z_j) (cm)		0 -	-
14					m_j (g/cm <sup>2</sup> )		0 x	mass depth
15					u(m_j) (g/cm <sup>2</sup> )		0 -	-
16					C_j (Bq/g)		0 y	activity concentration
17					u(C_j) (Bq/g)		0 -	-
18					f_j (Bq/cm <sup>2</sup> /y)		0 y	mean activity flux
19					u(f_j) (Bq/cm <sup>2</sup> /y)		0 -	-
20					s_j (cm/y)		0 y	mean sediment accumulation rate
21					u(s_j) (cm/y)		0 -	-
22					r_j (g/cm <sup>2</sup> /y)		0 y	mass accumulation rate
23					u(r_j) (g/cm <sup>2</sup> /y)		0 -	-
24					t_j (y)		0 x	mean age
25					u(t_j) (y)		0 -	-
26					$\Delta t_j$ (y)		0 -	-
27					u( $\Delta t_j$ ) (y)		0 -	-
28					T_j (y)		0 x	mean formation year
29					u(T_j) (y)		0 -	-

*Figura 23. Ficha de la base de datos de LEADS con el contenido relativo a uno de los modelos físicos empleados, CA.*

### 3.3.2. Interfaz de usuario e instrucciones de uso.

La interfaz de usuario de LEADS se muestra en la *Figura 24*. Esta es algo más compleja que las de las otras herramientas y aglutina más información. Al igual que hicimos anteriormente, podemos dividir la interfaz en cuatro regiones bien diferenciadas por su contenido.

**Region 1: Physical model and input fields**

Physical model: CA  Known Initial Concentration

Number of sections: 5

Total sediment length and inner diameter

L (cm)	u(L) (cm)	d (cm)	u(d) (cm)
10	0	5	0

Sampling date

Month	Day	Year
1	12	2023

**Region 2: Mathematical equations**

CA: Constant Activity.

$$C_i(t = 0) = C_0 = \frac{f_i}{r_i} = const. \quad (1)$$

$$C_i(t) = C_0 e^{-\lambda t_i} \quad (2)$$

$$s_i = \frac{\Delta z_i}{\Delta t_i} \quad (3)$$

$$r_i = \frac{m(i+1) - m(i)}{\Delta t_i} \quad (4)$$

**Region 3: Sections data table**

Section	$\Delta z_i$ (cm)	$u(\Delta z_i)$ (cm)	$\Delta m_i$ (g)	$u(\Delta m_i)$ (g)	A <sub>i</sub> 210-Pb (Bq)	u(A <sub>i</sub> 210-Pb) (Bq)	A <sub>i</sub> 226-Ra (Bq)	u(A <sub>i</sub> 226-Ra) (Bq)	Linear correlation	z <sub>i</sub> (cm)	u(z <sub>i</sub> ) (cm)	m <sub>i</sub> (g/cm <sup>2</sup> )	u(m <sub>i</sub> ) (g/cm <sup>2</sup> )	C <sub>i</sub> (Bq/g)	u
1	2	0.1000	100	1	1500	15	0	0	1	1	0.0500	2.5465	0.0127	15	
2	2	0.1000	75	1	1000	10	0	0	1	3	0.1118	7.0028	0.0191	13.3333	
3	2	0.1000	130	1	1200	12	0	0	1	5	0.1500	12.2231	0.0204	9.2308	
4	2	0.1000	120	1	900	9	0	0	1	7	0.1803	18.5893	0.0207	7.5000	
5	2	0.1000	80	1	500	5	0	0	0	9	0.2062	23.6823	0.0208	6.2500	

**Region 4: Layers data table**

Layer	z(i) (cm)	u(z(i)) (cm)	m(i) (g/cm <sup>2</sup> )	u(m(i)) (g/cm <sup>2</sup> )	C(i) (Bq/g)	u(C(i)) (Bq/g)	t(i) (y)	u(t(i)) (y)	T(i) (y)	u(T(i)) (y)
0	0	0	0	0	0	17.2239	0.9320	0	2023	1
1	2	0.1000	5.0930	0.0255	14.1667	0.1536	6.3140	1.2753	2017	1
2	4	0.1414	8.9127	0.0285	11.2821	0.1254	14.0889	1.2748	2009	1
3	6	0.1732	15.5335	0.0292	8.3654	0.0760	23.3027	1.2701	2000	1
4	8	0.2000	21.6451	0.0293	6.8750	0.0699	29.5475	1.2661	1994	1
5	10	0.2236	25.7194	0.0294	3.1250	0.0500	35.3869	2.8971	1988	3

**Region 4: Buttons**

Run    Graphic Interface

*Figura 24. Interfaz completa de LEADS con las diferentes secciones indicadas. 1. Modelo físico a utilizar y opciones extras del mismo a su derecha, e información global de la muestra (número de secciones, longitud, diámetro interno y fecha de muestreo). 2. Resumen de las principales ecuaciones del modelo elegido. 3. Tablas de datos para secciones y capas, donde las columnas naranjas son valores de entrada y las azules, de salida. 4. Botones para ejecutar el programa y abrir la interfaz gráfica.*

En primer lugar, hay que dirigirse, como es habitual, al área 1, ampliada en la *Figura 25* y situada en la parte superior izquierda de la pantalla. Allí tendremos que elegir el modelo físico que queremos utilizar para estudiar la muestra en el desplegable “Physical model”, lo que provocará la aparición de un resumen del mismo en 2. Después, debemos indicar cierta

información global de la muestra, empezando por el número de secciones en que se ha dividido el sedimento en el campo numérico “Number of sections”. A continuación, rellenamos las tablas “Total sediment length and inner diameter”, con la longitud total del sustrato y el diámetro interno junto con sus incertidumbres, y “Sampling date”, con la fecha de muestreo. Además, podremos seleccionar opciones adicionales en función de la información que tenemos acerca del sedimento y su proceso de formación. Vemos las posibilidades para cada estrategia en la *Figura 26*. Si hemos optado por CA, elegiremos entre dejar que la calculadora obtenga la concentración inicial por extrapolación de una regresión lineal de los datos con (40) y (41), o bien aportar este valor, si se conoce, clicando en el cuadro “Known Initial Concentration” y rellenando la tabla de la *Figura 26 (a)*. En cambio, para el modelo CS será obligatorio aportar el año medio de origen de una de las secciones de la muestra en “Reference date”, que aparece en la *Figura 26 (b)*. Por otro lado, al seleccionar CF dispondremos de dos opciones independientes. Para comenzar, decidiremos si utilizar o no el modelo de flujo periódico en el elemento “Periodic flux”. Más abajo, especificaremos si el inventario está completo o incompleto en “Incomplete inventory”. En el segundo caso, tendremos la posibilidad de elegir entre dos estrategias para calcularlo: bien a partir de una fecha de referencia para una de las capas entre secciones, como vemos en la *Figura 26 (c1)*, o bien conociendo la tasa de acumulación de masa correspondiente, según la *Figura 26 (c2)*.

Physical model   Known Initial Concentration

Number of sections

**Total sediment length and inner diameter**

L (cm)	u(L) (cm)	d (cm)	u(d) (cm)
10	0	5	0

**Sampling date**

Month	Day	Year
1	12	2023

*Figura 25. Apartado de entrada de datos globales de la muestra en LEADS.*

A continuación, debemos aportar información específica acerca de cada una de las secciones en la región naranja de la tabla “Sections data”, dentro del apartado 3 de la *Figura 24*. Será obligatorio rellenar las columnas dos, cuatro y seis, que se identifican con el grosor, la masa seca y actividad total o no soportada de  $^{210}\text{Pb}$  de las distintas porciones. Adicionalmente, se pueden indicar la actividad de  $^{226}\text{Ra}$ , si aún no hemos realizado la operación (21), y la

incertidumbre de las mencionadas magnitudes. Asimismo, si hemos seleccionado el modelo CA y desconocemos la concentración inicial de actividad, deberemos poner un uno en, al menos, tres de las filas en la columna adicional “Linear correlation”, con los que se realizará el ajuste lineal. De modo similar, para CFCS, se usarán, por defecto, todos los datos en el cálculo de regresión, pero se puede efectuar a tramos diferenciando cada uno con un número diferente y consecutivo al del grupo anterior. Cabe mencionar que, tanto la numeración de las fracciones de sedimento como la de las capas en “Layers data” se ejecutan automáticamente una vez se han escrito el número de secciones y la profundidad total de la muestra. Paralelamente, se calcula el grosor de cada porción equitativamente, aunque puede ser editado respetando los valores anteriores.

Known Initial Concentration

C_0 (Bq/g)	u(C_0) (Bq/g)
0	0

(a)

Reference date

Section	Month	Year
0	1	2023

(b)

Periodic Flux

Periodic Flux

Incomplete Inventory

Strategy

Reference Date

Known Accumulation Rate

Layer	Month	Year
0	1	2023

(c1)

Incomplete Inventory

Strategy

Reference Date

Known Accumulation Rate

Layer	r (g/cm <sup>2</sup> /y)	u(r) (g/cm <sup>2</sup> /y)
0	0	0

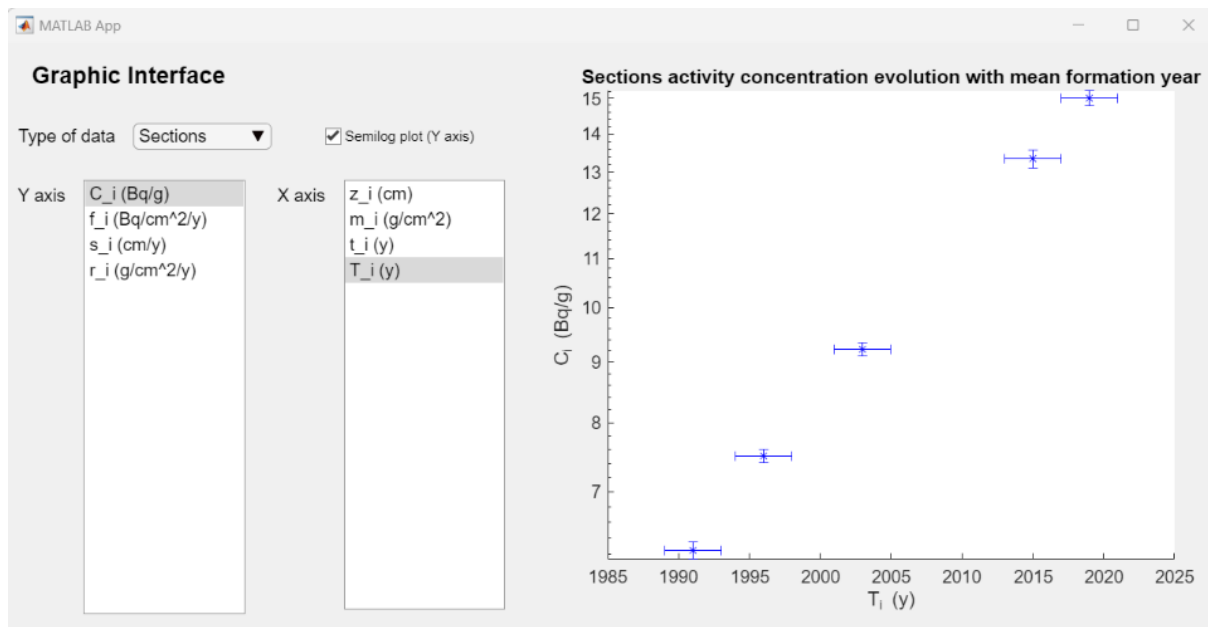
(c2)

Figura 26. Entradas de datos adicionales para tres de los modelos físicos incluidos en LEADS. (a) CA: concentración inicial conocida. (b) CS: fecha de origen de una de las capas. (c1) CF: flujo periódico e inventario incompleto calculado a partir de una fecha de referencia. (c2) CF: flujo periódico e inventario incompleto calculado a partir de una tasa de acumulación de masa conocida.

Una vez hemos rellenados todos los campos de entrada de datos que necesitamos, podemos pulsar el botón “Run” en la zona 4 de la Figura 24, situada en la esquina inferior derecha de la interfaz. Con ello, ejecutaremos la calculadora de datación, que mostrará los resultados obtenidos para cada sección y capa en las columnas azules de las tablas “Sections data” y “Layers data”, respectivamente. Para la primera, se incluyen las siguientes magnitudes: profundidad media, profundidad en masa media, concentración de actividad, flujo atmosférico de actividad medio, tasa de acumulación del sedimento media, tasa de acumulación de masa media, edad media, periodo de generación y año medio de formación. En cambio, para las capas se obtendrán: profundidad, profundidad en masa, concentración, edad y año de origen. Todo

esto es calculado por medio de las ecuaciones presentadas en el punto 2.4. Además, para cada resultado se obtendrá su incertidumbre utilizando de la propagación cuadrática de errores, según (59) [17].

Finalmente, tras pulsar el botón de “Run”, aparecerá a su derecha otro con el letrero “Graphic Interface”. Al clicarlo, se abrirá una ventana emergente con el aspecto que vemos en la *Figura 27*, donde se nos permitirá jugar un poco con los valores calculados y representar los resultados. Primero, tendremos que elegir si trabajar con datos relativos a secciones o capas en el desplegable “Type of data”. Después, seleccionaremos la magnitud que queremos hacer corresponder con el eje y de entre las disponibles en la lista “Y axis”, tras lo que optaremos por una de las opciones en “X axis”. Por último, existe la posibilidad de dar formato logarítmico al eje y, manipular la gráfica con zoom y guardarla como imagen en el equipo.



*Figura 27. Interfaz gráfica de LEADS. En la mitad izquierda se seleccionan las diferentes opciones de representación disponibles para los ejes situados a la derecha.*

#### 4. Ejemplos de uso de la aplicación RULES.

##### 4.1. Datación y análisis de muestras de calcita tomadas en el Peñón de Gibraltar con URADS y RaPCUBES.

Toda la información experimental y datos que vamos a aportar en este apartado han sido extraídos del artículo Neotectonics and shoreline history of the Rock of Gibraltar, southern Iberia [18]. En él, se realiza un estudio acerca de muestras marinas y continentales extraídas de diferentes zonas del Peñón de Gibraltar. El objetivo principal del trabajo es elaborar un modelo morfotectónico para evaluar la evolución temporal del desplazamiento vertical del terreno en

los últimos doscientos cincuenta mil años, periodo perteneciente al Pleistoceno Medio y Superior, y al Holoceno. Además, se analizan sistemas calcáreos expuestos a las condiciones ambientales externas, con las que se pretende conocer mejor el paleoclima de esa zona.

Gibraltar es un territorio de unos seis kilómetros cuadrados de superficie que se encuentra al sur de la Península Ibérica, a la que está unido mediante un istmo. Su elevación sobre el nivel del mar se debe, fundamentalmente, a las interacciones producidas a lo largo de millones de años entre las placas tectónicas Euroasiática y Africana. La acción conjunta de estas tensiones y los procesos de sedimentación y erosión de la superficie, ha provocado la aparición de una región de pendientes, generalmente, más suaves y menos desgastada por factores atmosféricos en la mitad oeste del Peñón. Mientras tanto, al este, encontramos una costa más escarpada y maltratada por los agentes climáticos. A partir de su crecimiento, los sedimentos y formaciones geológicas permanecen preservados de la acción del mar, salvo subidas puntuales de su nivel, aunque quedan sometidos a erosión y deposición por fenómenos ambientales y la acción de seres vivos. Además, se observa una estructura en escalera con diferentes secciones de estratos que han compuesto, en algún momento, parte de la costa de Gibraltar. Asimismo, se hallan distintos tipos de formaciones según su origen: sedimentario (terrazas marinas elevadas, arenas depositadas por el viento, brechas de la roca y sedimentos kársticos), abrasivo (acantilados y plataformas cortadas por olas, laderas escalonadas en secciones y sistemas endokársticos en cuevas profundas) o tectónico (tasa de subida con respecto al nivel del mar). En total, cubren un rango temporal que va desde la Edad del Hielo hasta la ocupación del terreno por fenicios y cartagineses hacia el siglo tercero antes de Cristo. De hecho, el Peñón comenzó a suscitar un gran interés académico a mediados del siglo dieciocho, cuando se encontraron los primeros restos neandertales de la zona. Así, los estudios de datación pueden ser también relevantes para ampliar conocimientos acerca de la hominización y vida del hombre prehistórico.

En particular, vamos a tratar doce muestras calcáreas distintas que han sido tomadas de espeleotemas situados en tres lugares diferentes de Gibraltar. Las medidas en cuestión las podemos ver en la *Tabla 1*. Desde GB0001 hasta GB0009, se corresponden con la entrada a la Cueva de Saint Michael. Por otro lado, GB0010 y GB0011 tienen su origen en la Cantera de Forbes. Ambos lugares se sitúan en la costa este del territorio y almacenan información al respecto del paleoclima, aunque el primero está a mayor altitud, por lo que esperamos que el rango temporal de sus especímenes sea mayor, alcanzando edades más antiguas. Por último, GB0207 fue extraído de un acantilado de la Bahía de Rosia, en la parte oeste del litoral gibraltareño, más aislado de las condiciones atmosféricas. Los valores de los cocientes de

actividad que presentamos han sido calculados en base a las medidas para los radionúclidos implicados con espectrometría alfa. Asimismo, las incertidumbres se han obtenido a partir de la propagación de los errores estadísticos en el conteo de desintegraciones, que han sido elegidos según el criterio uno sigma. Además, cada cantidad se identifica con el promedio de varias muestras tomadas de un mismo sistema. Cabe mencionar que, en los especímenes GB0002, GB0006 y GB0010, fueron halladas cantidades de detritus con contenido en  $^{238}\text{U}$ ,  $^{234}\text{U}$ ,  $^{230}\text{Th}$  y  $^{232}\text{Th}$ , que contaminan las mediciones de actividad [19]. En estos casos, se han utilizado técnicas L/L de disolución de los minerales empleando diferentes concentraciones de ácido nítrico. Después, se han empleado diagramas de Rosholt [20], en los que se representan los valores medidos de  $^{230}\text{Th}/^{232}\text{Th}$  frente a  $^{238}\text{U}/^{232}\text{Th}$  o  $^{234}\text{U}/^{232}\text{Th}$ . Las pendientes de las rectas de ajuste para cada conjunto de datos se asocian directamente con las ratios  $^{230}\text{Th}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  corregidas, respectivamente.

Localización	Código de muestra	$^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$	$^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$
<b>Cueva de Saint Michael</b>	GB0001	$0,974 \pm 0,014$	$0,747 \pm 0,032$
	GB0002	$1,060 \pm 0,035$	$0,246 \pm 0,025$
	GB0003	$1,067 \pm 0,020$	$0,551 \pm 0,021$
	GB0004	$0,997 \pm 0,012$	$0,723 \pm 0,025$
	GB0005	$1,045 \pm 0,018$	$0,725 \pm 0,025$
	GB0006	$1,029 \pm 0,035$	$0,476 \pm 0,051$
	GB0007	$1,023 \pm 0,022$	$0,394 \pm 0,015$
	GB0008	$1,052 \pm 0,017$	$0,319 \pm 0,012$
	GB0009	$1,021 \pm 0,023$	$0,767 \pm 0,028$
<b>Cantera de Forbes</b>	GB0010	$1,258 \pm 0,043$	$0,532 \pm 0,035$
	GB0011	$1,159 \pm 0,024$	$0,168 \pm 0,008$
<b>Bahía de Rosia</b>	GB0207	$1,005 \pm 0,022$	$0,833 \pm 0,037$

Tabla 1. Medidas de los cocientes de actividad  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  para diferentes muestras extraídas de tres localizaciones distintas del Peñón de Gibraltar [18].

Los resultados para la datación de cada muestra llevados a cabo en el artículo del estudio han sido conseguidos con ayuda del programa ISOPLOT [21]. También se han calculado los cocientes iniciales  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}_0$  en el instante en que se originaron dichos sistemas. Por nuestra parte, hemos introducido los valores de la *Tabla 1* en la interfaz de la aplicación URADS, previa selección del método  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ , sin marcar la casilla de independencia con la razón de  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ . Así, conseguimos la edad de cada espécimen. Adicionalmente, la herramienta RaPCUBES nos permitirá obtener las ratios iniciales  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}_0$ . Para ello, accederemos a la



serie radiactiva del  $^{238}\text{U}$  y seleccionaremos como núcleo padre al  $^{234}\text{U}$ . A continuación, aprovecharemos la similitud de la ecuación (13), que convertiremos a valores absolutos como

$$|R(t) - 1| = |R(0) - 1|e^{-\lambda_4 t}, \quad (62)$$

y relaciona las actividades de  $^{234}\text{U}$  y  $^{238}\text{U}$ , con la que describe la evolución temporal del primero de ellos si estuviera aislado,

$$A_4(t) = A_4(0)e^{-\lambda_4 t}. \quad (63)$$

De este modo, efectuaremos las asociaciones

$$A_4(t) \rightarrow |R(t) - 1| \quad (64)$$

$$A_4(0) \rightarrow |R(0) - 1|.$$

Por último, establecemos una diferencia de tiempos entre la fecha de medida y la de muestreo igual a la antigüedad aportada por URADS, teniendo en cuenta que el instante de cálculo debe coincidir con el momento de formación del sistema. Los resultados expuestos en el documento de referencia y los que hemos calculado nosotros con RULES están dispuestos en la *Tabla 2*.

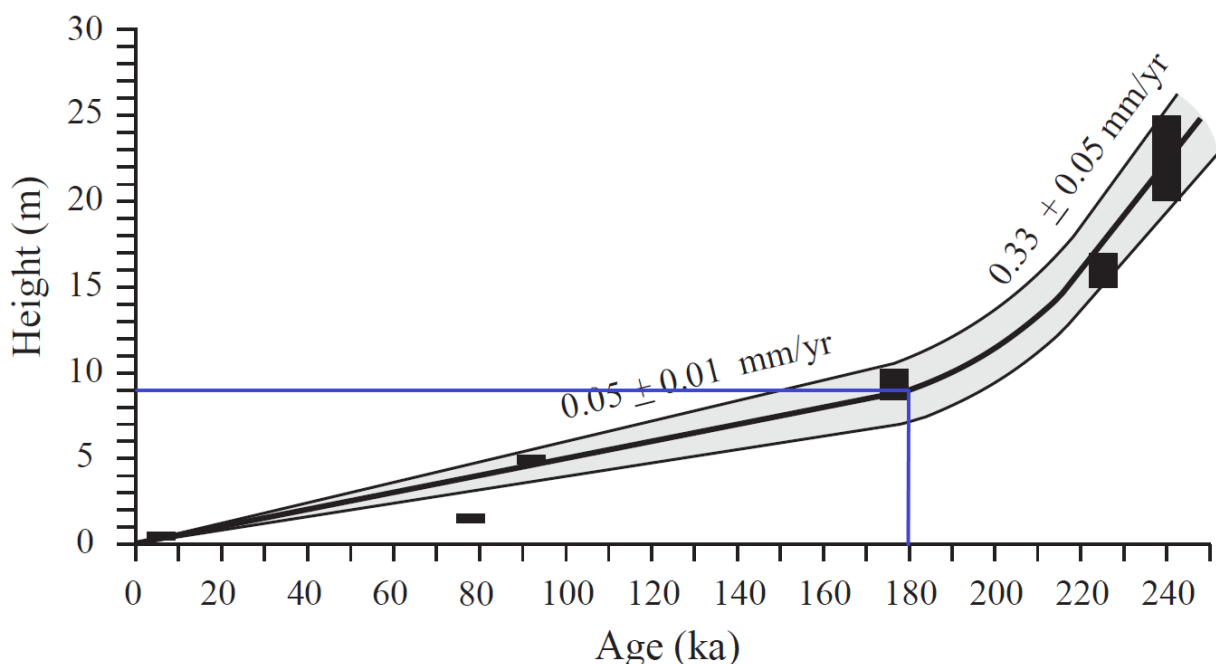
Localización	Código	Artículo		RULES	
	de muestra	Edad (ky)	$^{234}\text{U}/^{238}\text{U}_0$	Edad (ky)	$^{234}\text{U}/^{238}\text{U}_0$
Cueva de Saint Michael	GB0001	151,0 ± 14,0	0,960 ± 0,021	151,1 ± 20,3	0,960 ± 0,021
	GB0002	30,5 ± 3,5	1,066 ± 0,038	30,6 ± 5,1	1,065 ± 0,038
	GB0003	86,1 ± 4,9	1,085 ± 0,025	86,2 ± 7,0	1,085 ± 0,026
	GB0004	139,5 ± 9,9	0,995 ± 0,017	139,8 ± 14,0	0,996 ± 0,018
	GB0005	138,0 ± 9,0	1,066 ± 0,027	138,3 ± 13,6	1,067 ± 0,027
	GB0006	70,0 ± 11,0	1,035 ± 0,043	70,0 ± 14,9	1,035 ± 0,043
	GB0007	54,3 ± 2,7	1,027 ± 0,026	54,4 ± 3,8	1,027 ± 0,026
	GB0008	41,5 ± 1,8	1,058 ± 0,019	41,6 ± 2,7	1,058 ± 0,019
	GB0009	157,0 ± 13,0	1,032 ± 0,036	157,0 ± 18,3	1,033 ± 0,036
Cantera de Forbes	GB0010	79,8 ± 8,4	1,323 ± 0,054	80,0 ± 10,7	1,323 ± 0,054
	GB0011	19,9 ± 1,1	1,168 ± 0,025	19,9 ± 1,5	1,168 ± 0,025
Bahía de Rosia	GB0207	193,5 ± 24,0	1,009 ± 0,038	194,1 ± 34,8	1,009 ± 0,038

Tabla 2. Comparativa de resultados de datación presentados en el artículo [18] con los calculados utilizando RULES.

Como podemos ver, los valores, en todos los casos, son muy similares y compatibles según las incertidumbres obtenidas. Estas, para el cálculo de edades, resultan ser considerablemente mayores para los datos proporcionados por nuestra herramienta, lo que

indica que el método de propagación de errores descrito en el apartado 3.2.2 es más pesimista que el empleado por la utilidad ISOPLOT. En cambio, la técnica para reproducir los cocientes iniciales con RaPCUBES nos da cantidades prácticamente idénticas a las del artículo.

Por un lado, encontramos que las muestras de la costa este de Gibraltar, es decir, las de la Cueva de Saint Michael y las de la Cantera de Forbes, abarcan rangos temporales diferentes. Desde los treinta mil a los ciento sesenta mil años para la primera, situada a mayor altitud, y desde los veinte mil a los setenta mil para la segunda, más reciente. Por el otro, el espécimen extraído de la Bahía de Rosie esperamos que tenga una antigüedad relacionada con la altura sobre el nivel del mar a la que se colectó, por encima de los 9 m. Para comprobarlo, en el artículo de referencia se emplean datos obtenidos en otros estudios para elaborar el modelo morfotectónico, cuya gráfica representativa se visualiza en la *Figura 28*. En ella, se distinguen dos tramos principales caracterizados por las tasas de crecimiento de  $(0,05 \pm 0,01) \frac{\text{mm}}{\text{y}}$ , para edades entre los cero y ciento ochenta mil años, y  $(0,33 \pm 0,05) \frac{\text{mm}}{\text{y}}$ , para más de doscientos veinte años de antigüedad. Marcamos también el punto correspondiente a los nueve metros de altitud y vemos que, gráficamente, se corresponde con una edad de unos ciento ochenta mil años, lo que concuerda con el resultado obtenido para una altitud superior.



*Figura 28. Gráfica correspondiente al modelo morfotectónico del Peñón de Gibraltar, donde se representa la altura frente a la edad para diferentes datos extraídos de distintos artículos [18]. Marcamos en azul las coordenadas cartesianas del punto correspondiente a una altitud de nueve metros.*

#### 4.2. Datación de una muestra de sedimento tomada del golfo de Tehuantepec con LEADS.

La información que vamos a emplear para esta comparativa ha sido extraída del artículo <sup>210</sup>Pb sediment radiochronology: An integrated formulation and classification of dating models

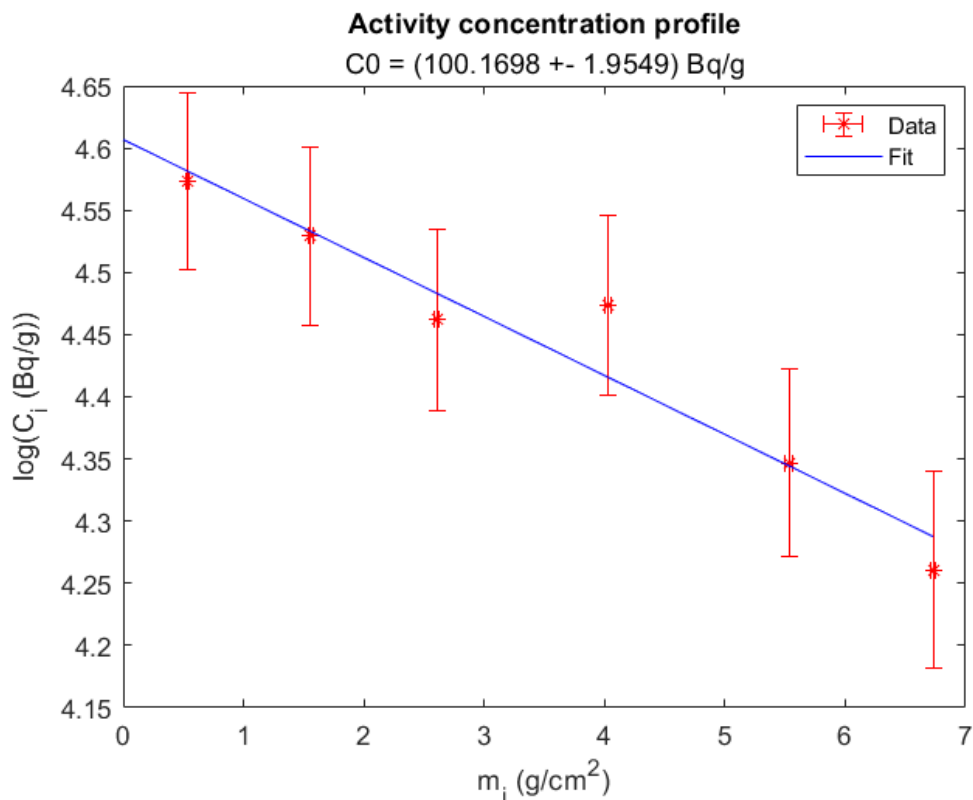
[17]. En él, se realiza la datación del sedimento TehuaII-21, dentro del proyecto Tehua II, recogido del Golfo de Tehuantepec, que se localiza en la costa oeste de Méjico. El método empleado para ello es el basado en  $^{210}\text{Pb}$ . En particular, en el documento se visualizan y comentan los resultados calculados por los modelos CA y CF.

El espécimen, colectado el once de octubre del año dos mil cuatro, con  $(15,0 \pm 0,1)$  cm de longitud total y diámetro interno de  $(10,0 \pm 0,1)$  cm, fue dividido en dieciocho secciones de igual grosor, de las que trataremos las quince superiores. A continuación, se midieron la masa seca y las actividades de  $^{210}\text{Pb}$  y  $^{226}\text{Ra}$  para cada una de las porciones. Los valores derivados de los presentes en el documento los presentamos en la *Tabla 3*. Aquí, las incertidumbres han sido obtenidas por medio de la propagación cuadrática de errores a partir de los expuestos en el artículo de referencia, y siguen el formato allí empleado. Adicionalmente, en un examen previo se concluyó que el perfil de actividad de  $^{137}\text{Cs}$ , también presente en el sustrato, presentaba un máximo absoluto en la séptima sección. Este pico se corresponde con los recurrentes ensayos nucleares llevados a cabo a principios de los años sesenta. Más concretamente, le asociaremos la fecha de 1963 para verificar la validez de los resultados calculados por las dos estrategias propuestas.

Nº de sección	$\Delta z_i$ (cm)	$\Delta m_i$ (g)	$\Delta A_i(^{210}\text{Pb})$ (Bq)	$\Delta A_i(^{226}\text{Ra})$ (Bq)
1	$1,0 \pm 0,1$	$84,162 \pm 0,001$	$8150 \pm 554$	$15,7 \pm 1,4$
2	$1,0 \pm 0,1$	$76,436 \pm 0,001$	$7084 \pm 492$	$15,7 \pm 1,4$
3	$1,0 \pm 0,1$	$88,073 \pm 0,001$	$7633 \pm 537$	$15,7 \pm 1,4$
4	$1,0 \pm 0,1$	$136,069 \pm 0,001$	$11930 \pm 834$	$15,7 \pm 1,4$
5	$1,0 \pm 0,1$	$99,256 \pm 0,001$	$7664 \pm 559$	$15,7 \pm 1,4$
6	$1,0 \pm 0,1$	$89,176 \pm 0,001$	$6320 \pm 481$	$15,7 \pm 1,4$
7	$1,0 \pm 0,1$	$163,809 \pm 0,001$	$8945 \pm 718$	$15,7 \pm 1,4$
8	$1,0 \pm 0,1$	$95,119 \pm 0,001$	$3357 \pm 328$	$15,7 \pm 1,4$
9	$1,0 \pm 0,1$	$105,168 \pm 0,001$	$3155 \pm 338$	$15,7 \pm 1,4$
10	$1,0 \pm 0,1$	$172,739 \pm 0,001$	$4819 \pm 519$	$15,7 \pm 1,4$
11	$1,0 \pm 0,1$	$109,757 \pm 0,001$	$2633 \pm 316$	$15,7 \pm 1,4$
12	$1,0 \pm 0,1$	$100,547 \pm 0,001$	$1860 \pm 257$	$15,7 \pm 1,4$
13	$1,0 \pm 0,1$	$119,071 \pm 0,001$	$1465 \pm 277$	$15,7 \pm 1,4$
14	$1,0 \pm 0,1$	$114,389 \pm 0,001$	$938 \pm 230$	$15,7 \pm 1,4$
15	$1,0 \pm 0,1$	$111,616 \pm 0,001$	$535 \pm 213$	$15,7 \pm 1,4$

Tabla 3. Datos derivados de los proporcionados en el artículo [17]. Se incluyen los grosores de las quince secciones, sus masas secas y actividades de  $^{210}\text{Pb}$  y  $^{226}\text{Ra}$ .

Comenzamos con la evaluación del sedimento con el método de CA. Como desconocemos la concentración de actividad en la capa más superficial, calcularemos su valor a partir del método de regresión lineal. Para ello, utilizaremos, al igual que en el artículo de referencia, los datos relativos a las seis primeras secciones. El ajuste efectuado se muestra en la *Figura 29* junto con el valor de concentración inicial y su incertidumbre, de  $(100,2 \pm 2,0) \frac{\text{Bq}}{\text{g}}$ , frente a los  $(100,1 \pm 1,0) \frac{\text{Bq}}{\text{g}}$  presentados en el escrito en el que nos basamos. Por otra parte, en la *Tabla 4* se recogen los resultados expuestos en el documento de apoyo y los calculados con LEADS para las tasas de acumulación de masa y los años medios de origen de cada una de las secciones. Los valores para las dos magnitudes son compatibles en todos los casos. Únicamente notamos un mayor pesimismo en el cálculo de errores con RULES, seguramente debido al intervalo de confianza considerado para obtener los parámetros del ajuste lineal por mínimos cuadrados, así como a las incertidumbres derivadas anteriormente para las actividades.



*Figura 29. Ajuste lineal para las seis primeras secciones del sedimento para obtener el valor de la concentración inicial.*

Con respecto al tratamiento del espécimen por la estrategia CF, los resultados se agrupan en la *Tabla 5*. En este caso, nos referimos a los relativos a las capas, numeradas desde el cero hasta el quince, donde esta última, por su localización y bajo la suposición de inventario completo, no puede ser determinada. Ahora, los valores proporcionados por LEADS también

son compatibles con los que encontramos en el artículo de referencia y, dado que no se utiliza ninguna regresión lineal, las incertidumbres derivadas son más similares.

Nº de sección	Artículo CA		LEADS CA	
	$r \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2\text{y}} \right)$	Año medio de origen	$r \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2\text{y}} \right)$	Año medio de origen
<b>1</b>	0,60 ± 0,48	2004 ± 2	0,60 ± 0,56	2004 ± 2
<b>2</b>	0,55 ± 0,64	2002 ± 2	0,55 ± 0,74	2002 ± 2
<b>3</b>	1,26 ± 2,94	2000 ± 2	1,26 ± 3,43	2000 ± 2
<b>4</b>	0,93 ± 1,05	2001 ± 2	0,94 ± 1,23	2001 ± 2
<b>5</b>	0,37 ± 0,24	1996 ± 2	0,37 ± 0,27	1997 ± 3
<b>6</b>	0,20 ± 0,08	1994 ± 2	0,20 ± 0,10	1994 ± 3
<b>7</b>	0,19 ± 0,04	1985 ± 3	0,19 ± 0,05	1985 ± 3
<b>8</b>	0,13 ± 0,04	1971 ± 3	0,13 ± 0,04	1971 ± 3
<b>9</b>	0,35 ± 0,31	1966 ± 3	0,36 ± 0,33	1966 ± 4
<b>10</b>	0,61 ± 0,59	1964 ± 3	0,61 ± 0,63	1964 ± 4
<b>11</b>	0,21 ± 0,12	1959 ± 4	0,21 ± 0,13	1959 ± 4
<b>12</b>	0,12 ± 0,05	1951 ± 4	0,12 ± 0,05	1951 ± 5
<b>13</b>	0,12 ± 0,05	1937 ± 6	0,12 ± 0,06	1938 ± 6
<b>14</b>	0,10 ± 0,06	1924 ± 8	0,10 ± 0,06	1925 ± 8
<b>15</b>	0,08 ± 0,05	1907 ± 13	0,08 ± 0,10	1908 ± 13

Tabla 4. Comparativa de resultados entre el artículo [17] con los obtenidos con LEADS para el modelo de CA.

Para concluir, compararemos las diferencias observadas entre los resultados derivados de cada uno de los dos modelos físicos utilizados. Para ello, nos remontamos a la información previa de que la sección número 7 debe estar asociada a un año de origen próximo a 1963. Por un lado, el método CA evalúa que dicha porción de sedimento procede, en promedio, del 1985, y la anterior y posterior, de 1994 y 1971. Estos valores se alejan bastante del esperado, de donde deducimos que la estrategia CA no es adecuada para realizar este estudio. De hecho, en general, se trata de un modelo no muy empleado por ser demasiado restrictivo y no capaz de describir la realidad en la mayoría de las situaciones. Por otra parte, al considerar CF podemos situar la séptima sección entre las capas 6 y 7, a las que corresponden los años de 1972 y 1960, respectivamente. Así, este método proporciona resultados más satisfactorios que el anterior o, al menos, cumple con la premisa que hemos enunciado. Ciertamente, el uso de la estrategia CF

para la datación de sedimentos sí que está más extendido y puede reflejar más fielmente la realidad.

Nº de capa	Artículo CF		LEADS CF	
	$r \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2\text{a}} \right)$	Año medio de origen	$r \left( \frac{\text{g}}{\text{cm}^2\text{a}} \right)$	Año medio de origen
<b>0</b>	0,30 ± 0,01	2005 ± 1	0,31 ± 0,05	2005 ± 1
<b>1</b>	0,29 ± 0,01	2001 ± 1	0,29 ± 0,02	2001 ± 1
<b>2</b>	0,27 ± 0,01	1998 ± 1	0,27 ± 0,02	1998 ± 1
<b>3</b>	0,24 ± 0,01	1993 ± 1	0,24 ± 0,02	1993 ± 1
<b>4</b>	0,20 ± 0,01	1985 ± 1	0,20 ± 0,01	1985 ± 1
<b>5</b>	0,18 ± 0,01	1979 ± 1	0,18 ± 0,01	1979 ± 1
<b>6</b>	0,18 ± 0,01	1972 ± 1	0,18 ± 0,01	1972 ± 1
<b>7</b>	0,17 ± 0,01	1960 ± 1	0,17 ± 0,01	1960 ± 1
<b>8</b>	0,19 ± 0,02	1953 ± 2	0,19 ± 0,02	1954 ± 2
<b>9</b>	0,17 ± 0,02	1946 ± 2	0,17 ± 0,02	1946 ± 2
<b>10</b>	0,11 ± 0,01	1930 ± 2	0,11 ± 0,01	1930 ± 2
<b>11</b>	0,09 ± 0,01	1916 ± 3	0,09 ± 0,01	1916 ± 3
<b>12</b>	0,08 ± 0,01	1900 ± 5	0,08 ± 0,01	1900 ± 5
<b>13</b>	0,06 ± 0,01	1878 ± 7	0,06 ± 0,02	1878 ± 7
<b>14</b>	0,03 ± 0,02	1845 ± 13	0,03 ± 0,01	1846 ± 13
<b>15</b>	—	—	—	—

Tabla 5. Comparativa de resultados entre el artículo [17] con los obtenidos con LEADS para el modelo de CF.

## 5. Conclusiones, utilidades y vías de desarrollo.

La herramienta RULES destaca por su simpleza, agilidad y versatilidad, permitiendo efectuar cálculos complejos de forma rápida con la mínima cantidad de información necesaria. Además, cuenta con una interfaz para cada aplicación bastante intuitiva y personalizable, lo que hace el proceso de introducción de datos más ameno, y la observación de resultados, más completa con ayuda de los apartados gráficos. Asimismo, en las diferentes ventanas del programa se pueden consultar algunas cuestiones de interés, tales como los esquemas de desintegración de las series radiactivas naturales ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$  y  $^{232}\text{Th}$ ) y la de  $^{237}\text{Np}$ . También se encuentran accesibles las ecuaciones sobre las que se sustentan los métodos de datación  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  y  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  por disequilibrios en la serie de uranio para muestras geológicas, y los

principales modelos físicos basados en perfiles de concentración del  $^{210}\text{Pb}$  en sedimentos lacustres y marinos (CA, CS, CF y CFCS). Adicionalmente, se trata de un paquete de software que estará disponible de forma totalmente gratuita para todo aquel que quiera hacer uso de él.

Con todo esto, resulta que el producto desarrollado tiene utilidad en una gran variedad de situaciones, con propósitos muy diversos. Para empezar, nos gustaría resaltar las posibilidades académicas, y es que RULES puede resultar de gran interés tanto para la labor de docencia, como para el estudio o, incluso, la realización de ejercicios e informes de prácticas. Esto puede resultar de interés tanto en la carrera como en estudios de posgrado en los que se traten las ecuaciones de Bateman, series radiactivas o técnicas de datación. Por otro lado, hemos demostrado, tanto en este documento como en el TFG presentado en 2022 [2], la viabilidad en el uso de la aplicación para la realización de estudios científicos de interés. Este valor se puede obtener, bien combinando los diferentes programas que lo componen en un mismo trabajo, o bien haciendo uso de uno de ellos de forma aislada. De este modo, es posible analizar medidas relacionadas con muestras de residuos industriales y hospitalarios en el contexto de protección radiológica, sistemas radiactivos naturales, ciclos de combustible nuclear o evolución de actividades en radiofármacos empleados en Medicina Nuclear. Todo ello gracias a que las aproximaciones empleadas en los cálculos son de gran utilidad en muchos casos.

Por otra parte, cabe destacar que la herramienta se encuentra, aún, en una primera versión y nunca antes ha sido distribuida al público. Con ello, la comunidad de usuarios podría contribuir a corregir algún fallo que no hubiera sido detectado por nosotros, y a alterar, suprimir o incorporar utilidades a la aplicación para enriquecerla aún más y aumentar así su valía. Este efecto podría verse magnificado si se publicara una versión abierta del software. A continuación, nosotros mismos propondremos algunas posibles vías de desarrollo relativas a cada uno de los programas que componen RULES, y que han surgido a lo largo del proceso de desarrollo del programa.

- Vías de desarrollo para RaPCUBES.
  - Nuevas magnitudes a la entrada y salida de datos, como concentración de actividad y masa.
  - Posibilidad de trabajar con muestras que, inicialmente, contengan poblaciones de más de un radioisótopo perteneciente a la misma familia radiactiva.
  - Inclusión de elementos trazadores, muy comúnmente utilizados, tales como el  $^{232}\text{U}$  en la serie del  $^{232}\text{Th}$ .
  - Desarrollo de una nueva herramienta paralela destinada a cálculos de producción de radioisótopos por medio de reacciones nucleares. Para ello, se debería

construir una base de datos específica con las secciones eficaces correspondientes.

- Vías de desarrollo para URADS.
  - Operación simultánea con datos de diferentes muestras que se quieran datar bajo las mismas condiciones.
  - Cálculo de magnitudes adicionales, como la concentración inicial del cociente de actividades  $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$  para el modelo  $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$  con dependencia del anterior.
  - Inclusión de mayor número de métodos, por ejemplo, permitiendo seleccionar los radionúclidos participantes de forma similar a como se hace en RaPCUBES y, una vez hecho esto, poder elegir un modelo matemático basado en las ecuaciones de cada una de las tres estrategias aquí presentadas.
  - Esquema de desintegración del  $^{238}\text{U}$  que muestre qué radioisótopos participan del método, por ejemplo, rodeándolos con un círculo rojo.
  - Aumento de las opciones de la interfaz gráfica, permitiendo elegir entre varias magnitudes, e incluso muestras.
  - Elaboración de herramientas análogas para otras series radiactivas, o inclusión de estas bajo la misma utilidad.
- Vías de desarrollo para LEADS.
  - Adición de otros modelos físicos más realistas de entre la infinidad de ellos que hay desarrollados. Así, se podrían considerar situaciones mucho más variadas, como falta de capas por erosión, presencia de residuos orgánicos, flujos de  $^{210}\text{Pb}$  no atmosféricos e, incluso, la redistribución de sustancias en el sedimento por causas gravitatorias o difusivas.
  - Posibilidad de leer los datos de entrada en un determinado formato, contenidos en un documento de Excel o archivo de texto. Igualmente, poder extraer los resultados en archivos equivalentes.
  - Más personalización al respecto de los datos de salida de la aplicación, pudiendo elegir, de entre una mayor variedad en la propia interfaz, qué magnitudes obtener como resultados y cuáles de ellos tener disponibles para representar en el apartado gráfico.
  - Desarrollo de herramientas similares para estudiar sedimentos por otros métodos.

Para concluir, pensamos que el proyecto aquí iniciado tiene un gran potencial, esperamos que se siga desarrollando y se convierta en una aplicación de gran interés.



## 6. Bibliografía.

- [1] IDPH (Iowa Department of Public Health), «Major Uses of Radioisotopes».
- [2] M. Martínez-Rojas, «Desarrollo de una herramienta informática para calcular actividades de radionúclidos presentes en las series radiactivas naturales», TFG, Universidad de Sevilla, Almendralejo, 2022.
- [3] N. Connor, «What is Bateman equation?», *radiation-dosimetry.org*, 2019, Accedido: 12 de junio de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.radiation-dosimetry.org/what-is-bateman-equation-radioactive-decay-definition/>
- [4] A. Ferrer Soria, «Física nuclear y de partículas», 3ª.Publications Universitat de Valencia, 2015.
- [5] H. Bateman, «Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations», en *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1910, pp. 243-247.
- [6] J. Magill y J. Galy, «Radioactivity and Nuclear Reactions», en *Radioactivity Radionuclides Radiation*, Springer, 2005, pp. 43-52.
- [7] N. Connor, «What is secular equilibrium?», *radiation-dosimetry.org*, 2019, Accedido: 12 de junio de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.radiation-dosimetry.org/what-is-secular-equilibrium-radioactive-equilibrium-definition/>
- [8] N. Connor, «What is transient equilibrium?», *radiation-dosimetry.org*, 2019, Accedido: 12 de junio de 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.radiation-dosimetry.org/what-is-transient-equilibrium-radioactive-equilibrium-definition/>
- [9] F. Doménech, «Rutherford y Soddy, los verdaderos alquimistas», *BBVA OpenMind*, n.º Ventana al conocimiento, 2021.
- [10] NNDC (National Nuclear Data Center), «NuDat3». <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/> (accedido 12 de junio de 2023).
- [11] «Enciclopedia química». <https://www.quimica.es/enciclopedia/> (accedido 12 de junio de 2023).
- [12] M. Ivanovich, A. G. Latham, y T.-L. Ku, «Uranium-series disequilibrium applications in geochronology», en *Uranium-series disequilibrium: applications to earth, marine and environmental sciences*, 2ª.Oxford: Clarendon Press, 1982.
- [13] M.B. Muñoz-García y J. Martín-Chivelet, «Datación de carbonatos por el método de U/Th: ejemplos en España», *Cuaternario y Geomorfología*, 2022.

- [14] A. Kaufman y W. Broecker, «Comparison of Th<sup>230</sup> and C<sup>14</sup> Ages for Carbonate Materials from Lakes Lahontan and Bonneville», *J Geophys Res*, vol. 70, pp. 4039-4054, ago. 1965.
- [15] J.-A. Sanchez-Cabeza, M. Díaz-Asencio, y A. C. Ruiz-Fernández, «Radiocronología de Sedimentos Costeros Utilizando <sup>210</sup>Pb: Modelos, Validación y Aplicaciones», Viena, 2012.
- [16] P. G. Appleby y F. Oldfield, «Application of lead-210 to sedimentation studies», en *Uranium-series disequilibrium applications in geochronology*, Oxford: Clarendon Press, 1982.
- [17] J. A. Sanchez-Cabeza y A. C. Ruiz-Fernández, «<sup>210</sup>Pb sediment radiochronology: An integrated formulation and classification of dating models», en *Geochimica et Cosmochimica*, ELSEVIER, 2012, pp. 183-200.
- [18] J. Rodríguez-Vidal, L. M. Cáceres, J. C. Finlayson, F. J. Gracia, y A. Martínez-Aguirre, «Neotectonics and shoreline history of the Rock of Gibraltar, southern Iberia», en *Quaternary Science*, ELSEVIER, 2004, pp. 2017-2029.
- [19] A. Martínez-Aguirre, J. M. Alcaraz-Pelegriña, y J. Rodríguez-Vidal, «U/Th dating of impure carbonates: <sup>230</sup>Th/<sup>232</sup>Th activity ratios in detrital material», *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, vol. 321, pp. 71-81, 2019.
- [20] J. N. Rosholt, «<sup>230</sup>Th/<sup>234</sup>U dating of travertine and caliche rinds», *Geological Society of America*, vol. 8, p. 1076, 1976.
- [21] K. R. Ludwig, «ISOPLOT». United States Geological Survey, pp. 91-445, 1991.