

Formalização da Coerência na TRIO-G aplicada à Cinética Química

Kevin Khristopher Kuznier
Formalização gerada com ChatGPT

November 7, 2025

Abstract

Este documento apresenta a formalização matemática da *dimensão da coerência* utilizada na Teoria TRIO-G aplicada à cinética química. A coerência é quantificada por um índice adimensional δ que multiplicado por uma escala energética R^* produz uma energia efetiva de coerência \emptyset que reduz a barreira de ativação efetiva. Para aplicações químicas por mol, adotamos a escala por bit $R^* = RT \ln 2$ que permite interpretar 1 bit como um fator de 2 na constante efetiva de reação.

1 Notação e convenções

- T : temperatura em kelvin (K).
- R : constante dos gases, $R = 8.314\,462\,618\,J\,mol^{-1}K^{-1}$.
- R^* : escala energética de coerência por mol. Por convenção adotamos

$$R^* = RT \ln 2. \quad (1)$$

- \emptyset : energia efetiva de coerência ($J\,mol^{-1}$).
- δ : índice adimensional de coerência, com

$$\emptyset = \delta R^*, \quad \delta = \frac{\emptyset}{R^*}. \quad (2)$$

- ΔG^\neq : energia livre de ativação padrão ($J\,mol^{-1}$).
- A : pré-exponencial (constante cinética de Arrhenius/Eyring conforme o modelo).

2 Constante efetiva com coerência

A coerência reduz a barreira de ativação efetiva segundo

$$\Delta G_{\text{eff}}^\neq = \Delta G^\neq - \emptyset = \Delta G^\neq - \delta R^*. \quad (3)$$

A constante efetiva é dada por

$$K_{\text{eff}} = A \exp\left(-\frac{\Delta G_{\text{eff}}^{\neq}}{RT}\right) = A \exp\left(-\frac{\Delta G^{\neq}}{RT}\right) \exp\left(\frac{\delta R^*}{RT}\right). \quad (4)$$

Com $R^* = RT \ln 2$ isso simplifica para

$$K_{\text{eff}} = A \exp\left(-\frac{\Delta G^{\neq}}{RT}\right) 2^{\delta}. \quad (5)$$

Portanto, uma unidade de δ (1 bit) corresponde a um fator 2 na constante efetiva.

3 Critério de fechamento (indicador F)

Definimos

$$F = \delta - \frac{\Delta Q}{c}, \quad (6)$$

onde ΔQ é a demanda de reorganização (energia ou quantidade normalizada) e c é a capacidade do microambiente (mesma unidade de ΔQ se energético).

- $F > 0$: reação favorecida (pré-organização suficiente).
- $F = 0$: limiar crítico.
- $F < 0$: reação não favorecida (meio desorganizado).

4 Extração experimental de δ (bits)

Se uma perturbação causa uma mudança na energia de ativação $\Delta\Delta G^{\neq}$ (J mol^{-1}), então a variação equivalente em bits é

$$\Delta\delta = \frac{\Delta\Delta G^{\neq}}{R^*} = \frac{\Delta\Delta G^{\neq}}{RT \ln 2}. \quad (7)$$

E

$$\frac{K_{\text{var}}}{K_{\text{ref}}} = 2^{\Delta\delta}, \quad \Delta\delta = \log_2\left(\frac{K_{\text{var}}}{K_{\text{ref}}}\right). \quad (8)$$

5 Exemplo numérico ($T = 300$ K)

Para $T = 300$ K,

$$R^* = RT \ln 2 \approx 1728.944 \text{ J mol}^{-1} \approx 1.7289 \text{ kJ mol}^{-1}. \quad (9)$$

Se uma mutação reduz ΔG^{\neq} em 5.0 kJ mol^{-1} :

$$\Delta\delta = \frac{5000 \text{ J mol}^{-1}}{1728.944 \text{ J mol}^{-1}} \approx 2.892 \text{ bits}, \quad (10)$$

o que corresponde a um fator de taxa $2^{2.892} \approx 7.42$.

6 Notas e recomendações

- Padronizar a escolha entre escala por partícula ($k_B T \ln 2$) ou por mol ($RT \ln 2$). Para cinética química por mol recomendamos $RT \ln 2$.
- Definir explicitamente as unidades de ΔQ e c (energéticas ou normalizadas) para que F seja adimensional.
- Evitar usar mc^2 sem renormalização para escalas químicas.
- Calibrar o modelo com dados experimentais (G^\ddagger) para mapear descritores estruturais em δ .

Arquivos gerados

Este pacote acompanha um arquivo CSV com exemplos numéricicos ($G \rightarrow \rightarrow$ fator 2).