

# 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  $\delta$  que multiplicado por uma escala energética  $R^*$  produz uma energia efetiva de coerência  $\varnothing$  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,  $R = 8.314\,462\,618\,\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ .
- $R^*$  : escala energética de coerência por mol. Por convenção adotamos

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

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

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

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

## 2 Constante efetiva com coerência

A coerência reduz a barreira de ativação efetiva segundo

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

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  $\delta$  (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  $\Delta Q$  é a demanda de reorganização (energia ou quantidade normalizada) e  $c$  é a capacidade do microambiente (mesma unidade de  $\Delta Q$  se energético).

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

### 4 Extração experimental de $\delta$ (bits)

Se uma perturbação causa uma mudança na energia de ativação  $\Delta\Delta G^{\neq}$  ( $\text{J mol}^{-1}$ ), 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 ( $T = 300 \text{ K}$ )

Para  $T = 300 \text{ K}$ ,

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

Se uma mutação reduz  $\Delta G^{\neq}$  em  $5.0 \text{ kJ mol}^{-1}$ :

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

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  $\Delta Q$  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  $\delta$ .

## Arquivos gerados

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