



Universidade Estadual
da Região Tocantina
do Maranhão

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS, NATURAIS E TECNOLÓGICAS - CCENT
LICENCIATURA EM MATEMÁTICA

Uma introdução a teoria dos Nós e suas aplicações na Biologia e Química

REGIVAN DE SOUZA SILVEIRA

Imperatriz - MA, 2026

REGIVAN DE SOUZA SILVEIRA

Uma introdução a teoria dos Nós e suas aplicações na Biologia e Química

Monografia apresentada ao curso Licenciatura em Matemática do Centro de Ciências Exatas, Naturais e Tecnológicas, da Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão, como requisito para a obtenção do grau de Licenciado em Matemática.

Orientadora Profa. Dra. Giovana Alves

Junho de 2026

S587i

Silveira, Regivan de Souza

Uma introdução a teoria dos nós e suas aplicações na biologia e química.
/ Regivan de Souza Silveira. – Imperatriz, MA, 2026.

68 f. ; il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Matemática) –
Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão – UEMASUL,
Imperatriz, MA, 2026.

1. Teoria dos nós. 2. Invariantes de nós. 3. Polinômio de Alexander. 4.
Polinômio de Jones I. Título.

CDU 510

Ficha elaborada pelo Bibliotecário: **Mateus de Araújo Souza – CRB: 13/955**

CCENT - Centro de Ciências Exatas, Naturais e Tecnológicas
Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão

Trabalho de Conclusão de Curso de Licenciatura em Matemática intitulado **Uma introdução a teoria dos Nós e suas aplicações na Biologia e Química** de autoria de Regivan de Souza Silveira, aprovada pela banca examinadora constituída pelos seguintes professores:

Documento assinado digitalmente
 GIOVANA ALVES
Data: 29/06/2026 08:42:19-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Profa. Dra. Giovana Alves
Orientadora

Documento assinado digitalmente
 CAROLINA CORDEIRO BATISTA
Data: 29/06/2026 08:39:05-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Profa. Dra. Carolina Cordeiro Batista
Universidade Estadual da Região Tocantina do
Maranhão

Documento assinado digitalmente
 CALEB DA SILVA ARAUJO CAMPELO
Data: 29/06/2026 08:29:33-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. Caleb da Silva Araujo Campelo
Universidade Estadual da Região Tocantina do
Maranhão

Imperatriz, 25 de junho de 2026

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais e irmãos. Obrigado por, mesmo de forma silenciosa, sempre torcerem por mim.

À Profa. Dra. Giovana Alves, por ter aceitado orientar este trabalho. Agradeço profundamente por, mesmo conhecendo minhas limitações, não ter dito não à minha empreitada.

Ao Prof. Dr. José Milton Lopes Pinheiro, por ter me mostrado os caminhos da escrita e da publicação acadêmica.

Aos professores, pelos ensinamentos e pela dedicação ao longo do curso. Obrigado por mostrarem que o conhecimento está, muitas vezes, escondido nos detalhes e que até as ideias aparentemente mais simples podem revelar grande profundidade.

Aos meus colegas de curso, pelo companheirismo, pelas conversas e pela troca de experiências que me permitiram crescer não apenas como estudante, mas também como pessoa. Obrigado por tornarem essa jornada mais leve.

À Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão (UEMASUL), pela oportunidade de formação acadêmica e pessoal ao longo destes anos. A conclusão deste trabalho representa não apenas o encerramento de uma etapa acadêmica, mas também o resultado de anos de aprendizado, desafios superados e experiências que levarei comigo para além da universidade.

“Se algo incendeia sua alma com propósito e desejo,
é seu dever deixar-se reduzir a cinzas por isso”

- Charles Bukowski

RESUMO

Este trabalho apresenta uma introdução à Teoria dos Nós e às suas aplicações nas ciências naturais, com ênfase na Biologia molecular e na Química topológica. O estudo foi motivado pela necessidade de integrar conceitos matemáticos abstratos à modelagem de problemas concretos dessas áreas, especialmente diante do avanço das técnicas de observação de estruturas moleculares complexas. Para isso, realizou-se uma revisão bibliográfica de caráter qualitativo, fundamentada em obras clássicas e artigos especializados. Foram abordados os principais conceitos da teoria, como nós, enlaces, isotopia ambiente, movimentos de Reidemeister e invariantes, com destaque para o número de cruzamentos, a tricolorabilidade, o determinante e os polinômios de Alexander e de Jones, calculados explicitamente para o nó trevo e o nó figura-oito. As aplicações analisadas mostram que esses invariantes são úteis para descrever a ação de topoisomerasas e recombinases sobre o DNA circular e para classificar moléculas topologicamente não triviais, como catenanos, rotaxanos e nós moleculares. Os resultados evidenciam que a Teoria dos Nós constitui uma ferramenta matemática eficaz para a compreensão e classificação de estruturas complexas presentes na Biologia e na Química.

Palavras-chave: Teoria dos Nós, invariantes de nós, polinômio de Alexander, polinômio de Jones, DNA.

ABSTRACT

This work presents an introduction to Knot Theory and its applications in the natural sciences, with an emphasis on molecular biology and topological chemistry. The study was motivated by the need to integrate abstract mathematical concepts into the modeling of concrete problems in these areas, especially given the advancement of techniques for observing complex molecular structures. To this end, a qualitative literature review was conducted, based on classic works and specialized articles. The main concepts of the theory were addressed, such as knots, linkages, ambient isotopy, Reidemeister motions, and invariants, with emphasis on the number of crossovers, tricolorability, the determinant, and the Alexander and Jones polynomials, explicitly calculated for the cloverleaf knot and the figure-eight knot. The applications analyzed show that these invariants are useful for describing the action of topoisomerases and recombinases on circular DNA and for classifying topologically non-trivial molecules, such as catenanes, rotaxanes, and molecular knots. The results show that Knot Theory is an effective mathematical tool for understanding and classifying complex structures found in Biology and Chemistry.

Key-words: Knot Theory, knot invariants, Alexander polynomial, Jones polynomial, DNA.

Lista de Figuras

2.1	Nó trivial à esquerda; nó trevo no centro; nó figura-oito à direita.	19
2.2	Enlace trivial à esquerda; elo de Hopf à direita.	20
2.3	Cruzamento positivo.	21
2.4	Cruzamento negativo.	21
2.5	Primeiro movimento de Reidemeister (R_1)	22
2.6	Segundo movimento de Reidemeister (R_2)	22
2.7	Terceiro movimento de Reidemeister (R_3)	22
2.8	Duas projeções do nó trevo.	24
2.9	Cruzamento.	26
2.10	K_+	27
2.11	K_-	27
2.12	K_0	27
4.1	Representação tricolorida do nó trevo.	44
4.2	Nó trevo: arcos e cruzamentos.	45
4.3	Nó figura-oito: arcos e cruzamentos.	51
5.1	Estrutura do DNA	56
5.2	Exemplos de catenanos, rotaxanos e nós relacionados	64

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CCENT	Centro de Ciências Exatas, Naturais e Tecnológicas
DNA	Ácido Desoxirribonucleico
RNA	Ácido Ribonucleico
UEMASUL	Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão
TCC	Trabalho de Conclusão de Curso

Sumário

AGRADECIMENTOS	5
RESUMO	7
ABSTRACT	8
1 Introdução	14
2 A Teoria dos Nós	17
2.1 Contexto histórico	17
2.2 Conceitos Iniciais	19
2.2.1 Nós e Enlaces	19
2.2.2 Isotopia e Equivalência de Nós	19
2.2.3 Diagramas de Nós	20
2.2.4 Movimentos de Reidemeister	21
2.3 Os invariantes	23
2.3.1 Número de Cruzamentos	23
2.3.2 Tricolorabilidade	23
2.3.3 Número de Ligação	24
2.3.4 Determinante de um Nó	25
2.3.5 Relações de Skein e Cálculo Recursivo	26
2.3.6 A Tríade de Skein	26
2.3.7 Polinômio de Alexander	27
2.3.8 Polinômio de Jones	28
2.3.9 A Relação de Skein do Polinômio de Alexander	30
2.3.10 A Relação de Skein do Polinômio de Jones	30
2.3.11 Comparação entre as Duas Relações de Skein	31
2.3.12 O Processo de Redução Recursiva	31

2.3.13	Cálculo Recursivo: O Nó Trevo 3_1	32
3	Demonstrações dos Invariantes	34
3.1	Invariância da Tricolorabilidade	34
3.2	Invariância do Número de Ligação	36
3.3	Invariância do Determinante	37
3.4	Invariância do Polinômio de Alexander	39
3.5	Invariância do Polinômio de Jones	40
4	Alguns Exemplos	43
4.1	O Nó Trevo (3_1)	43
4.1.1	Número de Cruzamentos	43
4.1.2	Tricolorabilidade	43
4.1.3	Determinante	44
4.1.4	Polinômio de Alexander	46
4.1.5	Polinômio de Jones	47
4.2	O Nó Figura-Oito (4_1)	49
4.2.1	Número de Cruzamentos	49
4.2.2	Tricolorabilidade	50
4.2.3	Determinante	50
4.2.4	Polinômio de Alexander	52
4.2.5	Polinômio de Jones	53
4.3	Tabela Comparativa dos Invariantes	54
5	Aplicações	55
5.1	Aspectos topológicos na Biologia	55
5.2	Aplicações da Teoria dos Nós na Biologia Molecular	57
5.2.1	O DNA como objeto topológico	57
5.2.2	Topoisomerases e alterações topológicas do DNA	59
5.2.3	Recombinases e teoria dos nós	59
5.2.4	Invariantes aplicados ao DNA: resultados experimentais	60
5.3	Aplicações da Teoria dos Nós na Química	61
5.3.1	Aspectos topológicos na Química	61
5.3.2	Moléculas topologicamente não triviais: catenanos e rotaxanos	63
5.3.3	Nós moleculares: síntese e classificação	64
5.3.4	Isomeria topológica e propriedades moleculares	65

5.4	Análise Crítica dos Invariantes no Contexto Interdisciplinar	66
-----	--	----

1 Introdução

A noção de nó está presente no cotidiano da maioria das pessoas. Seja ao amarrar os cadarços dos sapatos, ajustar uma gravata ou prender objetos com cordas, os nós fazem parte de práticas corriqueiras que, à primeira vista, parecem não possuir relação direta com a Matemática ou com as Ciências em geral. No entanto, essa percepção inicial é limitada, uma vez que o conceito de nó ultrapassa o senso comum e se insere em um contexto científico de grande relevância e profundidade teórica.

A Teoria dos Nós, ramo da Topologia, dedica-se ao estudo de curvas fechadas imersas no espaço tridimensional, considerando suas propriedades sob deformações contínuas, sem cortes ou colagens (ADAMS, 1994). Embora tenha surgido no contexto da Matemática Pura, especialmente a partir de investigações no século XIX, essa teoria consolidou-se ao longo do século XX como uma área de grande importância também em contextos aplicados, notadamente na Biologia e na Química (LICKORISH, 1997; ADAMS, 1994). Nesse cenário, a Teoria dos Nós oferece ferramentas matemáticas rigorosas para a modelagem e análise de estruturas complexas, permitindo uma compreensão mais aprofundada de fenômenos naturais.

No campo da Biologia molecular, por exemplo, moléculas de DNA frequentemente apresentam configurações altamente enoveladas, torcidas e entrelaçadas, que podem ser descritas matematicamente como nós e enlaces (BATES; MAXWELL, 2005). Tais configurações não constituem meras curiosidades geométricas, mas desempenham papel fundamental em processos celulares essenciais, como replicação, transcrição e recombinação genética (ALBERTS et al., 2017; ERNST; SUMNERS, 1990). Enzimas específicas, como as topoisomerases e recombinases, atuam diretamente na modificação dessas estruturas, promovendo alterações topológicas que garantem o funcionamento adequado do material genético (WANG, 2002; FULLER, 1978).

De maneira análoga, na Química, a existência de moléculas com estruturas entrelaçadas, como catenanos e rotaxanos, evidencia a relevância da topologia na descrição de compostos químicos complexos (DIETRICH-BUCHECKER; SAUVAGE, 1989; SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999). A classificação e o estudo dessas moléculas exigem ferramentas matemáticas capazes de distinguir diferentes tipos de entrelaçamentos, evidenciando mais uma vez a importância da Teoria dos Nós como instrumento interdisciplinar

(FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011; FLAPAN, 2000).

A relevância deste estudo justifica-se pela crescente necessidade de abordagens interdisciplinares que integrem conceitos matemáticos abstratos a problemas concretos das ciências naturais. Em um contexto científico cada vez mais orientado pela complexidade dos sistemas biológicos e químicos, a Teoria dos Nós destaca-se como uma ferramenta capaz de fornecer modelos precisos e interpretáveis para fenômenos que não podem ser plenamente compreendidos por meio de abordagens exclusivamente experimentais. Além disso, o avanço das técnicas laboratoriais, especialmente na Biologia molecular, tem permitido a observação direta de estruturas entrelaçadas, tornando ainda mais necessária a utilização de modelos matemáticos que auxiliem na sua descrição e análise (FERINGA, 2017).

Adicionalmente, este trabalho se justifica pela importância acadêmica e formativa do tema, sobretudo no âmbito da Matemática aplicada. A investigação das conexões entre Topologia, Biologia e Química contribui para a ampliação da visão do estudante acerca do papel da Matemática na ciência contemporânea, evidenciando seu potencial como linguagem universal para a modelagem de fenômenos complexos. Assim, ao explorar a Teoria dos Nós e suas aplicações, este estudo não apenas reforça a relevância dessa área no cenário científico, mas também promove uma reflexão sobre o caráter interdisciplinar do conhecimento, incentivando o desenvolvimento de novas pesquisas e aplicações.

Diante desse contexto, este trabalho de conclusão de curso tem como objetivo investigar os fundamentos da Teoria dos Nós e suas aplicações na Biologia e na Química. Busca-se, assim, destacar os principais modelos topológicos utilizados na descrição dessas estruturas, bem como os métodos matemáticos empregados para classificar e distinguir os diferentes tipos de nós observados em experimentos biológicos e químicos. Para tanto, realiza-se uma revisão bibliográfica de caráter qualitativo, com o intuito de compreender e evidenciar a relevância dessa teoria.

Com o objetivo de apresentar um resumo do que será desenvolvido ao longo do texto, segue uma descrição sucinta da organização do trabalho:

- No Capítulo 2, intitulado *A Teoria dos Nós*, situamos a teoria dos nós dentro do campo da topologia e, em seguida, apresentamos os conceitos e definições fundamentais. O capítulo divide-se em três seções:
 - Na Seção 2.1, apresentamos um breve histórico da teoria dos nós.
 - Na Seção 2.2, introduzimos os conceitos e definições topológicas fundamentais.
 - Na Seção 2.3, definimos cada um dos invariantes estudados neste trabalho.
- No Capítulo 3, demonstramos a invariância de cada um dos invariantes definidos no capítulo anterior, validando-os como ferramentas adequadas para a classificação

topológica de nós.

- No Capítulo 4, calculamos o valor de cada invariante para o nó trevo e para o nó figura-oito, ilustrando sua aplicação prática.
- No Capítulo 5, discutimos as aplicações da teoria dos nós, primeiramente na Biologia e, em seguida, na Química. Ao final do capítulo, apresentamos uma breve análise crítica dos invariantes estudados.

2 A Teoria dos Nós

A seguir daremos início a fundamentação teórica que guiou esse trabalho. Começaremos por situar a teoria do nós dentro do campo da topologia bem como trazer alguns conceitos chave para os capítulos que se sucedem.

2.1 Contexto histórico

Pertencente à Topologia, mais especificamente à Topologia Algébrica e Geométrica, a Teoria dos Nós apresenta um desenvolvimento histórico que não se deu de maneira linear. Seu surgimento remonta ao século XIX, período em que a própria Topologia ainda não estava plenamente consolidada como área formal da Matemática. De fato, muitos dos fundamentos rigorosos dessa disciplina só seriam estabelecidos ao longo do século XX. Ainda assim, diversos pesquisadores se dedicaram ao estudo de estruturas nodais, motivados tanto por questões matemáticas quanto por tentativas de explicar fenômenos físicos, o que contribuiu significativamente para a formação inicial desse campo de investigação (ADAMS, 1994; LICKORISH, 1997).

Entre os precursores da Teoria dos Nós, destaca-se Carl Friedrich Gauss, que investigou propriedades de curvas fechadas e introduziu conceitos fundamentais, como o número de enlace, estabelecendo uma das primeiras conexões entre geometria e topologia. Seus estudos sobre curvas no espaço e sua preocupação com a classificação de enlaces podem ser considerados como um ponto de partida para o desenvolvimento posterior da teoria (GAUSS, 1833 *apud* ADAMS, 1994).

No contexto da Física do século XIX, o físico britânico William Thomson, mais conhecido como Lord Kelvin, propôs a chamada teoria dos vórtices, segundo a qual os átomos seriam estruturas formadas por vórtices em um fluido contínuo e invisível denominado éter. Nessa perspectiva, diferentes elementos químicos corresponderiam a diferentes tipos de nós. Essa hipótese, embora posteriormente abandonada com o desenvolvimento da Física moderna, teve grande impacto ao estimular o estudo sistemático e a classificação de nós (THOMSON, 1867 *apud* KAUFFMAN, 2001).

Influenciado por essa ideia, o físico e matemático escocês Peter Guthrie Tait dedicou-se à tabulação de nós, organizando tabelas com base no número mínimo de cruzamentos. Seu trabalho constituiu uma das primeiras tentativas sistemáticas de classificação nodal e marcou o início de um estudo mais estruturado na área. Além disso, Tait formulou importantes conjecturas sobre propriedades dos diagramas de nós: as chamadas *conjecturas de Tait*, algumas das quais só foram demonstradas muitas décadas depois, com o auxílio do polinômio de Jones, evidenciando a profundidade e a antecipação de suas contribuições (TAIT, 1877 *apud* ADAMS, 1994).

Outro nome relevante nesse período foi James Clerk Maxwell, que, além de suas contribuições fundamentais ao eletromagnetismo, demonstrou interesse pela estrutura dos nós e enlaces. Maxwell investigou formas de representar e distinguir configurações nodais por meio de diagramas planos, introduzindo ideias que influenciaram diretamente o desenvolvimento posterior da teoria. Sua abordagem contribuiu para o entendimento de como projeções bidimensionais poderiam ser utilizadas para estudar objetos tridimensionais complexos (MAXWELL, 1870 *apud* ADAMS, 1994).

Com o declínio da teoria do éter no final do século XIX, o interesse físico pelos nós diminuiu, mas o tema foi gradualmente incorporado à Matemática Pura. No século XX, a Teoria dos Nós passou por um processo de formalização e consolidação, impulsionado pelo desenvolvimento da Topologia como disciplina autônoma. Nesse contexto, destaca-se o trabalho de Kurt Reidemeister, que estabeleceu um dos resultados fundamentais da teoria: a caracterização da equivalência de nós por meio de três movimentos elementares, hoje conhecidos como movimentos de Reidemeister. De maneira geral, esses movimentos correspondem a torcer ou destorcer uma alça do diagrama (movimento R1), deslizar uma alça por baixo ou por cima de outro segmento (movimento R2) e deslizar um segmento sobre ou sob um cruzamento (movimento R3). Esses movimentos permitem determinar quando dois diagramas representam o mesmo nó, constituindo uma ferramenta essencial para a análise e classificação nodal (REIDEMEISTER, 1927; LICKORISH, 1997).

Paralelamente, outros matemáticos, como J. W. Alexander, contribuíram significativamente para o avanço da área ao introduzir invariantes algébricos, como o polinômio de Alexander, que possibilitaram distinguir nós de maneira mais refinada. Ao longo do século XX, novos invariantes foram desenvolvidos, incluindo o polinômio de Jones, descoberto por Vaughan Jones em 1984, que estabeleceu profundas conexões entre a Teoria dos Nós, a Física matemática e a teoria quântica de campos, sendo reconhecido com a Medalha Fields em 1990 (ALEXANDER, 1928; JONES, 1985).

2.2 Conceitos Iniciais

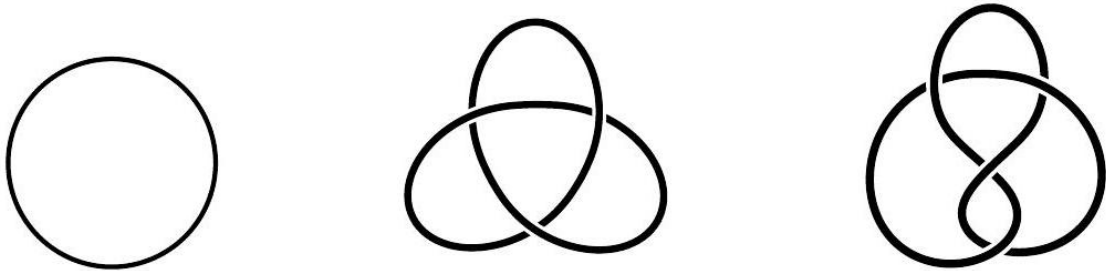
2.2.1 Nós e Enlaces

Intuitivamente, um nó pode ser pensado como uma corda cujas extremidades foram unidas após um embaralhamento no espaço. Do ponto de vista matemático, essa intuição é formalizada pela seguinte definição.

Definição 2.2.1. Seja $f : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ uma aplicação contínua e injetiva. A imagem $K = f(S^1)$ é denominada um **nó**.

O caso mais simples é o **nó trivial** (ou *unknot*), que corresponde a uma circunferência plana sem nenhum cruzamento. O primeiro nó não trivial é o **nó trevo** (*trefoil knot*), que possui exatamente três cruzamentos e não pode ser desembaralhado até a forma trivial, como será demonstrado adiante por meio da tricolorabilidade.

Figura 2.1: Nó trivial à esquerda; nó trevo no centro; nó figura-oito à direita.



Fonte: Adaptado de DIAS (2004).

Quando se considera mais de uma componente fechada, obtém-se o conceito de enlace.

Definição 2.2.2. Um **enlace** (*link*) com n componentes é a imagem de uma aplicação contínua e injetiva $f : S^1 \sqcup \dots \sqcup S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ (n cópias disjuntas de S^1). Cada cópia de S^1 é denominada uma **componente** do enlace.

Assim, enquanto o nó possui uma única componente, o enlace é formado por duas ou mais curvas fechadas que podem ou não estar entrelaçadas entre si. O exemplo mais simples de enlace não trivial é o **elo de Hopf** (*Hopf link*), formado por duas circunferências mutuamente entrelaçadas, cada uma passando pelo interior da outra.

2.2.2 Isotopia e Equivalência de Nós

Dizer que dois nós são **isotópicos** ou topologicamente equivalentes, significa afirmar que existe uma deformação contínua do espaço ambiente que leva um nó ao outro, sem

Figura 2.2: Enlace trivial à esquerda; elo de Hopf à direita.



Fonte: Adaptado de DIAS (2004).

permitir rompimentos ou auto-interseções. Formalmente:

Definição 2.2.3. Dois nós K_1 e K_2 são ditos **equivalentes** (ou isotópicos) se existe uma família contínua de homeomorfismos $H_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, com $t \in [0, 1]$, tal que $H_0 = \text{id}$ e $H_1(K_1) = K_2$. Tal família é chamada de **isotopia ambiente**.

Desse modo, a Teoria dos Nós não se ocupa de medidas geométricas como comprimento ou ângulo, mas sim das propriedades qualitativas que permanecem preservadas sob deformações contínuas. Dois nós que diferem apenas pela posição ou pelo tamanho no espaço são considerados equivalentes; o que importa é a estrutura de entrelaçamento da curva consigo mesma.

2.2.3 Diagramas de Nós

Para trabalhar com nós de maneira combinatória, utiliza-se o conceito de **diagrama de nó**: uma projeção genérica do nó em um plano, na qual cada ponto de cruzamento é representado por uma interrupção no arco que passa por baixo, indicando a relação de sobreposição entre os segmentos.

Definição 2.2.4. Um **diagrama** de um nó K é uma projeção regular de K em um plano, isto é, uma projeção em que todos os pontos de auto-interseção são duplos e transversais, com a indicação, em cada cruzamento, de qual arco passa por cima e qual passa por baixo.

A cada cruzamento de um diagrama orientado associa-se um **sinal**: um cruzamento é positivo (sinal $+1$) ou negativo (sinal -1), conforme a orientação relativa dos arcos, como ilustrado na figura abaixo. Note que para o primeiro caso (cruzamento positivo, Figura 2.10), o menor giro para que o cruzamento que passa por baixo chegue ao cruzamento que passa por cima é no sentido horário. Analogamente, para o cruzamento negativo (Figura 2.11), o menor giro que faríamos é no sentido anti-horário.

Um mesmo nó admite infinitos diagramas distintos, obtidos por diferentes projeções ou deformações. O problema central da teoria é determinar quando dois diagramas distintos representam o mesmo nó, questão respondida pelo Teorema de Reidemeister.

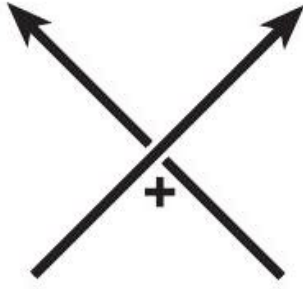


Figura 2.3: Cruzamento positivo.

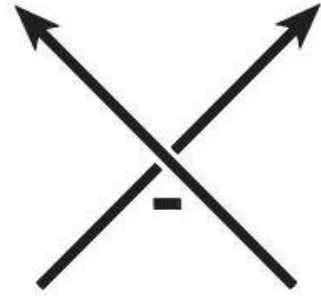


Figura 2.4: Cruzamento negativo.

2.2.4 Movimentos de Reidemeister

A equivalência entre nós pode ser estudada por meio dos **movimentos de Reidemeister**, três transformações locais em diagramas de nós introduzidas por Kurt Reidemeister em 1927. O resultado central é o seguinte:

Teorema 1 (Reidemeister, 1927 *apud* Lickorish, 1997). *Dois diagramas representam o mesmo nó se e somente se é possível transformar um no outro por meio de uma sequência finita de movimentos de Reidemeister R_1 , R_2 e R_3 .*

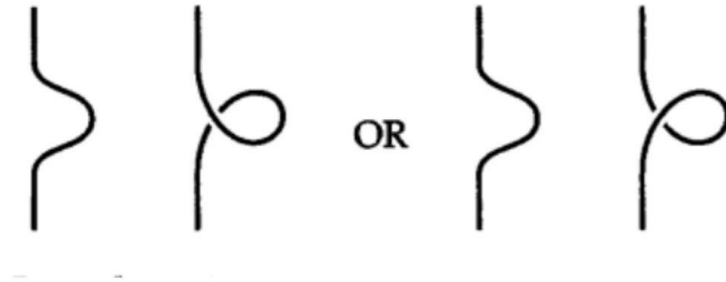
Esse teorema é fundamental porque reduz a questão topológica da equivalência de nós a uma questão combinatória sobre diagramas planos. Os três movimentos são definidos a seguir.

Definição 2.2.5. Um **movimento de Reidemeister** é uma transformação local em um diagrama de nó que altera os arcos ou cruzamentos em uma região delimitada, deixando o restante do diagrama inalterado.

- R_1 : **Torção.** Introduz ou remove uma torção simples em um arco do diagrama, criando ou eliminando um único cruzamento. Esse movimento corresponde, intuitivamente, a enrolar ou desenrolar uma alça na corda.
- R_2 : **Piston.** Introduz ou remove dois cruzamentos entre dois arcos sobrepostos. Esse movimento corresponde a aproximar ou afastar dois segmentos paralelos da corda, fazendo com que um passe sobre o outro e depois retorne à posição original.
- R_3 : **Deslizamento.** Faz passar um arco por cima ou por baixo de um cruzamento já existente entre outros dois arcos, sem alterar o número total de cruzamentos do diagrama.

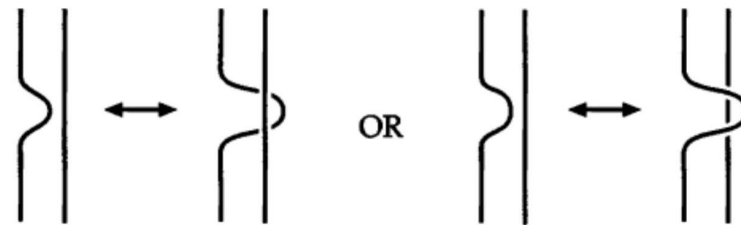
É importante observar que os movimentos de Reidemeister não apenas preservam o nó representado, mas também são os únicos movimentos necessários: qualquer isotopia entre

Figura 2.5: Primeiro movimento de Reidemeister (R_1)



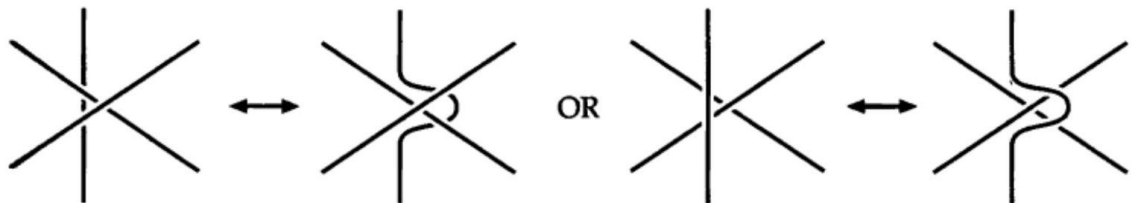
Fonte: Adams (1994).

Figura 2.6: Segundo movimento de Reidemeister (R_2)



Fonte: Adams (1994).

Figura 2.7: Terceiro movimento de Reidemeister (R_3)



Fonte: Adams (1994).

dois nós pode ser decomposta em uma sequência finita desses três tipos de operações locais. Essa propriedade torna os movimentos de Reidemeister a ferramenta combinatória central da Teoria dos Nós, sendo utilizados sistematicamente para verificar se uma determinada quantidade associada a diagramas constitui de fato um invariante de nós basta verificar que ela permanece inalterada sob cada um dos três movimentos.

2.3 Os invariantes

O objetivo central da Teoria dos Nós é classificar os nós, ou seja, determinar quando dois nós são equivalentes ou distintos. Para isso, utilizam-se os **invariantes de nós**: quantidades matemáticas numéricas, polinomiais ou algébricas que permanecem inalteradas sob isotopias ambiente e, portanto, assumem o mesmo valor para quaisquer dois nós equivalentes.

Definição 2.3.1. Um **invariante de nó** é uma função φ definida sobre o conjunto de nós (ou enlacs) que satisfaz: se K_1 e K_2 são equivalentes, então $\varphi(K_1) = \varphi(K_2)$.

A contrapositiva é a propriedade fundamental para aplicações: se $\varphi(K_1) \neq \varphi(K_2)$, então K_1 e K_2 são **certamente distintos**. A recíproca, no entanto, não é necessariamente verdadeira: invariantes iguais não garantem equivalência, o que motiva a busca por invariantes cada vez mais poderosos. Nas subseções seguintes, apresentam-se os invariantes que serão utilizados ao longo deste trabalho, selecionados por sua relevância para as aplicações discutidas no Capítulo 5.

2.3.1 Número de Cruzamentos

O **número de cruzamentos** de um nó K , denotado $c(K)$, é o menor número de cruzamentos presente em qualquer diagrama que represente K .

Definição 2.3.2. O **número de cruzamentos** de um nó K é definido por

$$c(K) = \min\{\text{número de cruzamentos de } D \mid D \text{ é um diagrama de } K\}.$$

Esse invariante organiza os nós em tabelas: o nó trivial possui $c = 0$; o nó trevo possui $c = 3$; o nó figura-oito possui $c = 4$. Para cada valor de c , existe um número finito de nós distintos. Embora intuitivo, o número de cruzamentos é um invariante de poder limitado: existem pares de nós distintos com o mesmo valor de c , de modo que esse critério sozinho não é suficiente para classificar todos os nós.

2.3.2 Tricolorabilidade

A **tricolorabilidade** é um invariante combinatório que determina se é possível colorir os arcos de um diagrama de nó com três cores, respeitando uma regra específica em cada cruzamento.

Definição 2.3.3. Um nó K é **tricolorável** se existe uma atribuição de cores escolhidas de um conjunto de três cores distintas aos arcos de algum diagrama de K , de modo que:

1. em cada cruzamento, os três arcos envolvidos são todos da mesma cor ou todos de cores distintas;
2. ao menos duas cores são efetivamente utilizadas.

A regra de coloração pode ser expressa algebricamente: se em um cruzamento o arco superior recebe a cor b e os arcos laterais recebem as cores a e c , então a condição de tricolorabilidade exige que

$$a + c \equiv 2b \pmod{3}.$$

A tricolorabilidade é de fato um invariante porque se preserva sob os três movimentos de Reidemeister. Como consequência, o nó trevo é tricolorável como se verifica diretamente atribuindo uma cor distinta a cada um de seus três arcos enquanto o nó trivial não é, pois qualquer coloração válida resulta em todos os arcos com a mesma cor. Isso prova rigorosamente que o nó trevo não é equivalente ao nó trivial.

Figura 2.8: Duas projeções do nó trevo.



Fonte: Adams (1994).

A tricolorabilidade é um caso particular do invariante mais geral de p -colorabilidade, definido módulo um primo p , que generaliza a ideia de coloração e está intimamente relacionado ao determinante do nó.

2.3.3 Número de Ligação

O **número de ligação** (*linking number*) é um invariante inteiro definido para enlases orientados de duas componentes. Dado um enlace $L = K_1 \cup K_2$, o número de ligação $lk(K_1, K_2)$ é calculado a partir de qualquer diagrama do enlace: considera-se apenas os cruzamentos em que arcos de componentes distintas se cruzam e soma-se os sinais desses cruzamentos, dividindo o resultado por dois.

Definição 2.3.4. Dado um enlace orientado $L = K_1 \cup K_2$, o **número de ligação** é definido por

$$lk(K_1, K_2) = \frac{1}{2} \sum_{\text{cruzamentos mistos}} \varepsilon(c),$$

onde a soma percorre todos os cruzamentos entre arcos de K_1 e K_2 , e $\varepsilon(c) \in \{+1, -1\}$ é o sinal do cruzamento c .

O número de ligação é simétrico: $lk(K_1, K_2) = lk(K_2, K_1)$. O elo de Hopf possui número de ligação ± 1 (conforme a orientação adotada), enquanto o enlace de Whitehead possui número de ligação igual a zero, apesar de suas componentes estarem geometricamente entrelaçadas, evidenciando que esse invariante embora útil, não captura todo o entrelaçamento topológico.

No contexto biológico, o número de ligação possui interpretação direta: em uma molécula de DNA circular de dupla fita, as duas cadeias polinucleotídicas formam as componentes de um enlace, e lk contabiliza quantas vezes uma fita está enrolada em torno da outra ao longo de toda a molécula. Esse valor se relaciona ao superenrolamento do DNA pela equação de White: $Lk = Tw + Wr$, onde Tw representa a torção intrínseca da dupla hélice e Wr o superenrolamento global (BATES; MAXWELL, 2005).

2.3.4 Determinante de um Nó

O **determinante** de um nó K , denotado $\det(K)$, é um invariante inteiro obtido a partir da matriz de cruzamentos associada a um diagrama de K . Para construí-la, atribui-se a cada arco do diagrama uma variável e, para cada cruzamento com arco superior d e arcos laterais a e b , escreve-se a relação:

$$a + b - 2d = 0.$$

O conjunto dessas relações forma um sistema linear cuja matriz de coeficientes é a **matriz de cruzamentos** M . O determinante do nó é então definido como:

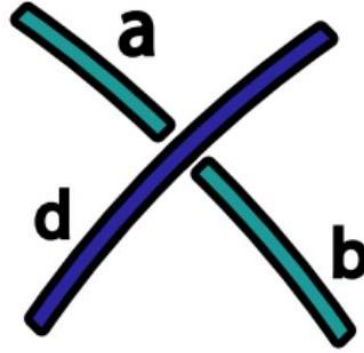
Definição 2.3.5. O **determinante** de um nó K é o valor

$$\det(K) = |\det(M')|,$$

onde M' é qualquer submatriz quadrada obtida de M pela remoção de uma linha e uma coluna.

O resultado independe da escolha da linha e coluna removidas, o que garante que o determinante está bem definido. Além disso, o determinante possui uma interpretação

Figura 2.9: Cruzamento.



Fonte: Adaptado de Lima (1994).

direta em termos de coloração: um nó K é p -colorável, para um primo p , se e somente se $p \mid \det(K)$. Em particular, K é tricolorável se e somente se $3 \mid \det(K)$.

Para os nós elementares: $\det(\text{unknot}) = 1$; $\det(3_1) = 3$ (nó trevo); $\det(4_1) = 5$ (nó figura-oito). Esses valores confirmam que o nó trevo é tricolorável ($3 \mid 3$) e que o nó figura-oito é 5-colorável, mas não tricolorável ($3 \nmid 5$).

2.3.5 Relações de Skein e Cálculo Recursivo

As relações de skein constituem um dos instrumentos mais poderosos e elegantes da Teoria dos Nós: elas permitem calcular invariantes polinomiais de nós e enlacs complexos por meio de uma redução recursiva a diagramas progressivamente mais simples, até atingir o nó trivial, cujo invariante é conhecido. Mais do que uma ferramenta computacional, as relações de skein funcionam como sistemas axiomáticos que definem os invariantes polinomiais de maneira independente de qualquer escolha de diagrama, garantindo simultaneamente a existência e a unicidade do invariante.

2.3.6 A Tríade de Skein

O ponto de partida é a observação de que qualquer cruzamento em um diagrama orientado pode ser modificado de três maneiras distintas, produzindo uma **tríade de diagramas** que diferem entre si apenas em uma região local:

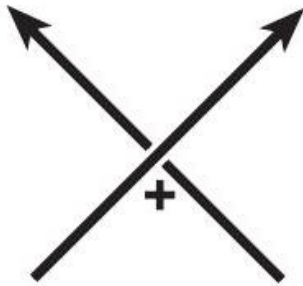
Definição 2.3.6. Dado um diagrama D com um cruzamento distinguido, a **tríade de skein** associada a esse cruzamento é o conjunto de três diagramas $\{K_+, K_-, K_0\}$, onde:

1. K_+ : diagrama com cruzamento positivo na região distinguida;

2. K_- : diagrama com cruzamento negativo na região distinguida;
3. K_0 : diagrama com o cruzamento **resolvido**: os dois arcos são desconectados do cruzamento e reconectados sem sobreposição, seguindo a orientação.

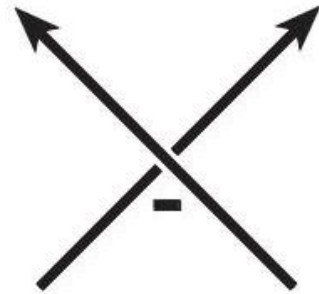
Os três diagramas são idênticos fora da região distinguida.

Figura 2.10: K_+ .



Fonte: Adpatado de Dias (2004).

Figura 2.11: K_- .



Fonte: Adpatado de Dias (2004).

Figura 2.12: K_0 .



Fonte: Adpatado de Dias (2004).

É fundamental observar que K_+ , K_- e K_0 não representam necessariamente o mesmo tipo de objeto topológico: se K_+ é um nó, K_0 pode ser um enlace de duas componentes, e vice-versa. Essa flexibilidade é precisamente o que torna as relações de skein tão poderosas: elas relacionam invariantes de nós com invariantes de enlaces, criando um sistema recursivo unificado.

2.3.7 Polinômio de Alexander

O **polinômio de Alexander**, denotado $\Delta_K(t)$, foi introduzido por James Waddell Alexander em 1928 e constitui o primeiro invariante polinomial da história da Teoria dos

Nós. Ele é obtido a partir da **matriz de Alexander**, construída de maneira análoga à matriz de cruzamentos, porém com coeficientes no anel de polinômios de Laurent $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$: em cada cruzamento, as relações entre os arcos incorporam a variável t , de modo que a relação em um cruzamento positivo é

$$t \cdot a + (1 - t) \cdot b - c = 0,$$

e em um cruzamento negativo,

$$t^{-1} \cdot a + (1 - t^{-1}) \cdot b - c = 0.$$

Definição 2.3.7. O **polinômio de Alexander** de um nó K é o polinômio $\Delta_K(t) \in \mathbb{Z}[t, t^{-1}]$ obtido como o determinante de qualquer submatriz quadrada máxima da matriz de Alexander de K , normalizado de modo que $\Delta_K(1) = 1$ e que o coeficiente do termo de menor grau seja positivo.

O polinômio de Alexander satisfaz uma **relação de skein**, que permite calculá-lo recursivamente. Para qualquer tríade de diagramas K_+ , K_- e K_0 que diferem entre si apenas em um cruzamento, sendo K_+ com cruzamento positivo, K_- com cruzamento negativo e K_0 com o cruzamento resolvido, vale:

$$\Delta_{K_+}(t) - \Delta_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2}) \Delta_{K_0}(t).$$

Para os nós elementares:

$$\Delta_{\text{unknot}}(t) = 1, \quad \Delta_{3_1}(t) = t - 1 + t^{-1}, \quad \Delta_{4_1}(t) = -t + 3 - t^{-1}.$$

O determinante de um nó pode ser recuperado a partir do polinômio de Alexander pela relação $\det(K) = |\Delta_K(-1)|$, mostrando que o polinômio de Alexander é um invariante estritamente mais poderoso que o determinante. Contudo, ele possui limitações: não distingue um nó de seu espelho e não detecta todos os nós não triviais existem nós não triviais cujo polinômio de Alexander coincide com o do nó trivial (LICKORISH, 1997).

2.3.8 Polinômio de Jones

Em 1984, o matemático neozelandês Vaughan Jones descobriu um novo invariante polinomial que representou uma ruptura significativa na Teoria dos Nós: o **polinômio de Jones**, denotado $V_K(t)$. Sua descoberta surgiu de conexões inesperadas com a teoria de álgebras de operadores, especificamente as álgebras de von Neumann, estabelecendo pontes

profundas entre Topologia, Física estatística e teoria quântica de campos. A importância da descoberta foi reconhecida com a Medalha Fields concedida a Jones em 1990 (JONES, 1985).

O polinômio de Jones é um polinômio de Laurent na variável $t^{1/2}$, definido de forma única pela seguinte condição inicial e relação de skein:

Definição 2.3.8. O **polinômio de Jones** $V_K(t)$ é o único invariante de nós orientados satisfazendo:

1. $V_{\text{unknot}}(t) = 1$;
2. Para qualquer tríade K_+, K_-, K_0 :

$$t^{-1}V_{K_+}(t) - tV_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}(t).$$

Para os nós elementares:

$$V_{3_1}(t) = -t^{-4} + t^{-3} + t^{-1} \quad (\text{nó trevo à esquerda}),$$

$$V_{4_1}(t) = t^2 - t + 1 - t^{-1} + t^{-2} \quad (\text{nó figura-oito}).$$

O polinômio de Jones supera o de Alexander em poder discriminatório em aspectos fundamentais. Em particular, ele é capaz de distinguir um nó de sua imagem especular (ou *mirror image*), obtida ao trocar todos os cruzamentos positivos por negativos e vice-versa. Um nó é dito **quiral** quando não é equivalente à sua própria imagem especular; caso contrário, é chamado **aquiral** (ou anfiquiral). O nó trevo é o exemplo clássico de nó quiral: o trevo à esquerda e o trevo à direita não são equivalentes entre si, possuindo polinômios de Jones distintos, enquanto seus polinômios de Alexander coincidem. Além disso, o polinômio de Jones detecta a quiralidade de vários nós e foi utilizado para demonstrar as conjecturas de Tait sobre alternância de diagramas, que permaneciam em aberto desde o século XIX (JONES, 1985; LICKORISH, 1997).

Apesar de seu maior poder, o polinômio de Jones também possui limitações conhecidas: a questão de se ele detecta completamente o nó trivial, ou seja, se $V_K(t) = 1$ implica que K é o nó trivial permanece em aberto até os dias atuais, constituindo um dos principais problemas não resolvidos da Teoria dos Nós (LICKORISH, 1997).

2.3.9 A Relação de Skein do Polinômio de Alexander

Nesta seção, define-se o polinômio de Alexander e o polinômio de Jones por meio de suas respectivas relações de skein, abordagem alternativa e equivalente à construção combinatória apresentada anteriormente, porém mais adequada à análise das propriedades algébricas de cada invariante. Em ambos os casos, a relação de skein, juntamente com a condição de normalização sobre o nó trivial, determina o invariante de forma única sobre qualquer tríade $\{K_+, K_-, K_0\}$. Como se verá, a comparação entre as duas relações evidencia uma diferença estrutural fundamental entre os dois polinômios: enquanto a relação do polinômio de Alexander é simétrica em K_+ e K_- , a do polinômio de Jones é assimétrica, fato que está diretamente relacionado à capacidade deste último de detectar a quiralidade de um nó.

Definição 2.3.9. O **polinômio de Alexander** $\Delta_K(t)$ é o único invariante de nós e enlaces orientados satisfazendo:

1. $\Delta_{\bigcirc}(t) = 1$ (nó trivial);
2. Para qualquer tríade $\{K_+, K_-, K_0\}$:

$$\Delta_{K_+}(t) - \Delta_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2}) \Delta_{K_0}(t). \quad (\text{SA})$$

A relação (SA) possui uma estrutura notável: ela é **simétrica** em K_+ e K_- , no sentido de que trocar os papéis de K_+ e K_- apenas troca o sinal do lado esquerdo, e o fator $(t^{1/2} - t^{-1/2})$ é antissimétrico sob a substituição $t \mapsto t^{-1}$. Isso implica que o polinômio de Alexander satisfaz a simetria $\Delta_K(t) = \Delta_K(t^{-1})$ a menos de uma unidade de $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$, refletindo o fato de que ele não distingue um nó de seu espelho.

Além disso, avaliando (SA) em $t = 1$:

$$\Delta_{K_+}(1) - \Delta_{K_-}(1) = (1 - 1) \Delta_{K_0}(1) = 0,$$

o que implica $\Delta_{K_+}(1) = \Delta_{K_-}(1)$ para qualquer tríade. Como $\Delta_{\bigcirc}(1) = 1$ e qualquer nó pode ser reduzido ao nó trivial por mudanças de cruzamento, conclui-se por indução que $\Delta_K(1) = 1$ para todo nó K , a condição de normalização é portanto, uma consequência da relação de skein, não um axioma independente (Lickorish, 1997).

2.3.10 A Relação de Skein do Polinômio de Jones

Definição 2.3.10. O **polinômio de Jones** $V_K(t)$ é o único invariante de nós e enlaces orientados satisfazendo:

1. $V_{\bigcirc}(t) = 1$ (nó trivial);
2. Para qualquer tríade $\{K_+, K_-, K_0\}$:

$$t^{-1}V_{K_+}(t) - tV_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}(t). \quad (SJ)$$

A relação (SJ) é **assimétrica** em K_+ e K_- : os coeficientes t^{-1} e t têm módulos iguais mas papéis distintos. Essa assimetria é precisamente o que permite ao polinômio de Jones distinguir um nó de seu espelho: substituindo t por t^{-1} em (SJ) e comparando com a relação original, obtém-se $V_{\bar{K}}(t) = V_K(t^{-1})$, onde $\bar{K}$ denota o espelho de K . Se $V_K(t) \neq V_K(t^{-1})$, então K e $\bar{K}$ são distintos, ou seja, o nó é **quiral**.

Avaliando (SJ) em $t = 1$:

$$V_{K_+}(1) - V_{K_-}(1) = 0,$$

de modo que $V_K(1) = 1$ para todo nó K , analogamente ao caso do polinômio de Alexander.

2.3.11 Comparação entre as Duas Relações de Skein

A tabela 2.1 a seguir compara as duas relações de skein, evidenciando suas diferenças estruturais:

2.3.12 O Processo de Redução Recursiva

O poder prático das relações de skein reside no seguinte algoritmo de cálculo:

1. Escolhe-se um cruzamento distinguido no diagrama de K ;
2. Forma-se a tríade $\{K_+, K_-, K_0\}$;
3. Aplica-se a relação de skein para expressar o invariante de K em termos dos invariantes de K_- (ou K_+) e K_0 ;
4. Repete-se o processo recursivamente para cada um dos dois diagramas resultantes, escolhendo um novo cruzamento em cada etapa;
5. O processo termina quando todos os diagramas da recursão são o nó trivial ou o enlace trivial, cujos invariantes são conhecidos.

Tabela 2.1: Comparação entre as relações de skein de Alexander e Jones

Propriedade	Alexander $\Delta_K(t)$	Jones $V_K(t)$
Relação de skein	$\Delta_{K_+} - \Delta_{K_-} = (t^{1/2} - t^{-1/2})\Delta_{K_0}$	$t^{-1}V_{K_+} - tV_{K_-} = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}$
Simetria em K_+ , K_-	Sim (coeficientes iguais)	Não (coeficientes t^{-1} e t)
Detecta quiralidade	Não	Sim ($V_{\bar{K}}(t) = V_K(t^{-1})$)
Anel de coeficientes	$\mathbb{Z}[t^{1/2}, t^{-1/2}]$	$\mathbb{Z}[t^{1/2}, t^{-1/2}]$
Valor no nó trivial	1	1
Valor em $t = 1$	1 para todo nó	1 para todo nó
Relação com determinante	$\det(K) = \Delta_K(-1) $	$ V_K(-1) = \text{invariante de Arf}$

Fonte: elaborada pelo autor com base em Lickorish (1997) e Jones (1985).

A terminação do processo é garantida pelo seguinte argumento: cada aplicação da relação de skein reduz o número de cruzamentos em pelo menos uma unidade em um dos dois ramos da recursão (K_- ou K_0 tem menos cruzamentos que K_+ , ou vice-versa). Como o número de cruzamentos é um inteiro não negativo, o processo termina após um número finito de etapas (LICKORISH, 1997).

A consistência, o fato de que diferentes escolhas de cruzamento distinguido conduzem ao mesmo invariante, não é imediata e constitui um resultado não trivial, demonstrável por indução no número de cruzamentos. É essa consistência que garante que as relações de skein definem de fato uma função bem definida sobre as classes de equivalência de nós, e não apenas sobre diagramas específicos.

2.3.13 Cálculo Recursivo: O Nó Trevo 3_1

Ilustra-se o processo de redução recursiva calculando o polinômio de Alexander do nó trevo 3_1 a partir da relação (SA).

O nó trevo possui um diagrama com três cruzamentos negativos. Escolhendo o primeiro cruzamento como distinguido, a tríade é:

- $K_- = 3_1$ (nó trevo à esquerda);

- K_+ : diagrama com o cruzamento invertido para positivo, equivalente ao nó trivial $\bigcirc$;
- K_0 : diagrama com o cruzamento resolvido, equivalente ao nó trivial $\bigcirc$.

Aplicando a relação (SA):

$$\Delta_{K_+}(t) - \Delta_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2}) \Delta_{K_0}(t).$$

Substituindo $\Delta_{K_+}(t) = 1$ e $\Delta_{K_0}(t) = 1$:

$$1 - \Delta_{3_1}(t) = t^{1/2} - t^{-1/2},$$

$$\Delta_{3_1}(t) = 1 - t^{1/2} + t^{-1/2}.$$

Esse resultado contém potências seminteiras de t . Isso indica que o cruzamento escolhido introduziu uma assimetria na normalização. Multiplica-se por $t^{1/2}$ para normalizar, obtendo:

$$\Delta_{3_1}(t) = t - 1 + t^{-1}. \quad (2.1)$$

Verificação: $\Delta_{3_1}(1) = 1 - 1 + 1 = 1$.

Verificação com o determinante: $|\Delta_{3_1}(-1)| = |-1 - 1 - 1| = 3 = \det(3_1)$.

O resultado obtido é consistente com o cálculo direto pela matriz de Alexander apresentado na Seção 4.1, confirmando a equivalência dos dois métodos.

Embora nenhum invariante isolado seja suficiente para classificar completamente todos os nós, o uso combinado dessas ferramentas amplia significativamente a capacidade de identificação e distinção entre diferentes estruturas. Essa perspectiva torna-se especialmente importante quando se deseja aplicar a Teoria dos Nós à modelagem de sistemas físicos, químicos e biológicos complexos.

3 Demonstrações dos Invariantes

Neste capítulo, demonstra-se rigorosamente que cada quantidade apresentada na capítulo anterior constitui de fato um invariante de nós, isto é, que seu valor permanece inalterado sob isotopias ambiente. A estratégia central, em todos os casos, consiste em verificar a invariância sob cada um dos três movimentos de Reidemeister, condição que, pelo Teorema de Reidemeister, é necessária e suficiente para garantir a invariância topológica.

3.1 Invariância da Tricolorabilidade

Inicia-se a verificação dos invariantes pela tricolorabilidade, definida no capítulo anterior como a existência de uma coloração válida dos arcos do diagrama em três cores. Demonstra-se que essa propriedade se preserva sob cada um dos três movimentos de Reidemeister, garantindo seu status de invariante topológico.

Teorema 2. *A tricolorabilidade é um invariante de nós, isto é, se dois nós K_1 e K_2 são equivalentes, então K_1 é tricolorável se e somente se K_2 é tricolorável.*

Demonstração. Como dois nós são equivalentes se e somente se seus diagramas se relacionam por uma sequência finita de movimentos de Reidemeister, basta demonstrar que a tricolorabilidade se preserva sob cada um dos três movimentos R_1 , R_2 e R_3 . Em cada caso, mostra-se que qualquer coloração válida antes do movimento pode ser estendida a uma coloração válida após o movimento, e vice-versa.

Recorda-se que uma coloração é válida se: (i) cada arco recebe uma das três cores, digamos $\{0, 1, 2\}$; (ii) em cada cruzamento, os três arcos são todos da mesma cor ou todos de cores distintas, condição expressa por $a + c \equiv 2b \pmod{3}$, onde b é o arco superior; (iii) ao menos duas cores são utilizadas.

Movimento R_1 (torção). O movimento R_1 introduz ou remove uma torção simples, criando ou eliminando um cruzamento no qual o mesmo arco passa sobre si mesmo. Seja a a cor do arco antes da torção. Após a aplicação de R_1 , o cruzamento criado envolve três segmentos do mesmo arco original, todos com cor a . A condição de coloração exige $a + a \equiv 2a \pmod{3}$, o que é sempre satisfeito. Portanto, qualquer coloração válida antes

de R_1 permanece válida após R_1 , com a cor do arco original atribuída ao novo segmento criado. A remoção da torção é imediata: basta suprimir o segmento extra e o cruzamento, mantendo a cor original. Logo, R_1 preserva a tricolorabilidade.

Movimento R_2 (piston). O movimento R_2 introduz dois cruzamentos entre dois arcos, digamos com cores a e b . Após a aplicação de R_2 , surgem dois novos cruzamentos e um novo segmento intermediário, cuja cor deve ser determinada pela condição de coloração. No primeiro cruzamento, a condição exige que o segmento intermediário c satisfaça $a + c \equiv 2b \pmod{3}$, ou seja, $c \equiv 2b - a \pmod{3}$. No segundo cruzamento, a condição exige $c + a \equiv 2b \pmod{3}$, ou seja, $c \equiv 2b - a \pmod{3}$, a mesma equação. Portanto, o valor de c é univocamente determinado e consistente. Para verificar que a coloração permanece válida, analisam-se dois subcasos:

- Se $a = b$: então $c \equiv 2a - a = a \pmod{3}$, de modo que todos os três arcos têm a mesma cor a . A condição de coloração é satisfeita (todos iguais). O número de cores utilizadas não diminui.
- Se $a \neq b$: então $c \equiv 2b - a \pmod{3}$. Como $\{0, 1, 2\}$ tem exatamente três elementos e $a \neq b$, o valor $c \equiv 2b - a \pmod{3}$ é o terceiro elemento do conjunto, distinto de a e de b . A condição de coloração é satisfeita (todos distintos). O número de cores utilizadas não diminui.

A remoção dos dois cruzamentos pelo movimento inverso de R_2 simplesmente elimina o segmento intermediário c , restaurando a coloração original. Logo, R_2 preserva a tricolorabilidade.

Movimento R_3 (deslizamento). O movimento R_3 desliza um arco por cima de um cruzamento existente, sem alterar o número total de cruzamentos. Sejam a , b e c as cores dos três arcos envolvidos na região afetada pelo movimento. A condição de coloração no cruzamento existente antes do movimento é $a + c \equiv 2b \pmod{3}$. Após a aplicação de R_3 , os três arcos permanecem os mesmos, mas suas relações de sobreposição nos cruzamentos são alteradas. Verifica-se, por inspeção direta das configurações antes e após o movimento, que a condição $a + c \equiv 2b \pmod{3}$ implica que as novas relações de cruzamento também são satisfeitas com as mesmas cores a , b e c atribuídas aos respectivos arcos. Portanto, R_3 preserva a tricolorabilidade.

Como a tricolorabilidade se preserva sob R_1 , R_2 e R_3 , e como qualquer isotopia entre dois nós equivalentes pode ser decomposta em uma sequência finita desses movimentos, conclui-se que a tricolorabilidade é um invariante de nós. ■

Como consequência imediata do resultado provado, exibe-se a seguir o primeiro exemplo de aplicação da tricolorabilidade como ferramenta de distinção entre nós.

Corolário 3. O nó trevo 3_1 não é equivalente ao nó trivial.

Demonstração. O nó trevo é tricolorável: basta atribuir uma cor distinta a cada um de seus três arcos, digamos as cores 0, 1 e 2. Em cada um dos três cruzamentos do nó trevo, os três arcos envolvidos recebem cores distintas, satisfazendo a condição $a + c \equiv 2b \pmod{3}$. De fato, $0 + 1 \equiv 2 \cdot 2 = 4 \equiv 1 \pmod{3}$, verificando-se analogamente para os demais cruzamentos. O nó trivial, por outro lado, possui um único arco sem cruzamentos: qualquer coloração válida atribui a mesma cor a esse arco, utilizando apenas uma cor. Como a condição (iii) exige ao menos duas cores, o nó trivial não é tricolorável. Como a tricolorabilidade é um invariante e os dois nós diferem nesse invariante, eles não são equivalentes. ■

3.2 Invariância do Número de Ligação

Passa-se agora ao número de ligação, invariante definido para enlases orientados de duas componentes a partir dos sinais dos cruzamentos mistos. Verifica-se sua invariância sob R_1 , R_2 e R_3 , com atenção especial ao cancelamento dos sinais opostos introduzidos pelo movimento R_2 .

Teorema 4. *O número de ligação $lk(K_1, K_2)$ é um invariante de enlases orientados de duas componentes.*

Demonstração. Dado um enlace orientado $L = K_1 \cup K_2$, o número de ligação é definido por

$$lk(K_1, K_2) = \frac{1}{2} \sum_{\text{cruzamentos mistos}} \varepsilon(c),$$

onde a soma percorre todos os cruzamentos em que arcos de K_1 e K_2 se cruzam, e $\varepsilon(c) \in \{+1, -1\}$ é o sinal do cruzamento c , determinado pela orientação relativa dos arcos. Deve-se mostrar que esse valor não se altera sob os movimentos de Reidemeister.

Movimento R_1 . O movimento R_1 cria ou remove um cruzamento em que o mesmo arco passa sobre si mesmo. Por definição, esse cruzamento envolve dois segmentos da mesma componente, ambos de K_1 ou ambos de K_2 , portanto não é um cruzamento misto. Ele não contribui para a soma que define $lk(K_1, K_2)$, de modo que o número de ligação não se altera sob R_1 .

Movimento R_2 . O movimento R_2 introduz ou remove dois cruzamentos entre dois arcos. Analisam-se dois subcasos segundo a natureza dos arcos envolvidos:

- *Arcos da mesma componente:* os cruzamentos criados não são mistos e não afetam $lk(K_1, K_2)$.
- *Arcos de componentes distintas:* os dois cruzamentos criados são mistos. Pela geometria do movimento R_2 , os dois novos cruzamentos têm necessariamente sinais opostos: se o primeiro tem sinal $+1$, o segundo tem sinal -1 , e vice-versa. Sua contribuição líquida para a soma é $(+1) + (-1) = 0$. Portanto, $lk(K_1, K_2)$ não se altera sob R_2 .

Movimento R_3 . O movimento R_3 desliza um arco por sobre um cruzamento existente, sem criar nem remover cruzamentos. O número total de cruzamentos mistos permanece o mesmo, e pode-se verificar por análise direta das oito configurações possíveis de orientação dos três arcos envolvidos que a soma dos sinais dos cruzamentos mistos não se altera. Portanto, $lk(K_1, K_2)$ não se altera sob R_3 .

Como o número de ligação é preservado sob R_1 , R_2 e R_3 , ele é um invariante de enlases orientados. ■

De maneira análoga ao caso da tricolorabilidade, o número de ligação fornece uma aplicação imediata como ferramenta de distinção entre enlases: basta calcular esse invariante para dois enlases e compará-lo. Ilustra-se essa ideia com o par mais simples de enlases de duas componentes, o elo de Hopf e o enlace trivial.

Corolário 5. O elo de Hopf não é equivalente ao enlace trivial de duas componentes.

Demonstração. O elo de Hopf possui dois cruzamentos mistos, ambos de mesmo sinal. Tomando a orientação padrão, ambos têm sinal $+1$, de modo que $lk = \frac{1}{2}(1 + 1) = 1$. O enlace trivial de duas componentes possui zero cruzamentos mistos, portanto $lk = 0$. Como os números de ligação são distintos, os dois enlases não são equivalentes. ■

3.3 Invariância do Determinante

Estuda-se em seguida o determinante do nó, definido a partir da matriz de cruzamentos. Embora sua invariância decorra diretamente da invariância do polinômio de Alexander, apresenta-se aqui uma demonstração alternativa, baseada em propriedades da matriz de cruzamentos e independente dessa relação.

Teorema 6. O determinante $\det(K) = |\Delta_K(-1)|$ é um invariante de nós.

Demonstração. O determinante é definido como o valor absoluto do polinômio de Alexander avaliado em $t = -1$, isto é, $\det(K) = |\Delta_K(-1)|$. Sua invariância decorre diretamente

da invariância do polinômio de Alexander, demonstrada na subseção seguinte. Contudo, apresenta-se aqui uma demonstração alternativa e independente, baseada na matriz de cruzamentos.

A matriz de cruzamentos M de um diagrama de K com n arcos e n cruzamentos é uma matriz $n \times n$ cujas entradas são inteiras, construída a partir das relações $a + b - 2d = 0$ em cada cruzamento. O determinante de K é definido como o valor absoluto do determinante de qualquer submatriz $(n - 1) \times (n - 1)$ obtida pela remoção de uma linha e uma coluna de M .

Para que essa definição seja consistente, deve-se verificar: (i) que o valor é independente da escolha da linha e coluna removidas; e (ii) que o valor não se altera sob os movimentos de Reidemeister.

Independência da submatriz. A soma de todas as colunas de M é o vetor nulo, pois em cada cruzamento a relação $a + c - 2b = 0$ implica que as entradas de cada linha somam zero. Portanto, M tem posto no máximo $n - 1$, e qualquer submatriz $(n - 1) \times (n - 1)$ tem o mesmo determinante (a menos de sinal), o que garante que $|\det(M')|$ é bem definido.

Invariância sob R_1 . O movimento R_1 introduz um novo arco e um novo cruzamento no qual esse arco passa sobre si mesmo. A nova linha da matriz de cruzamentos correspondente a esse cruzamento contém o coeficiente -2 na coluna do novo arco e $+1$ nas colunas dos dois segmentos adjacentes. Por operações elementares de linha, pode-se mostrar que o determinante da submatriz resultante é igual ao determinante da submatriz original, preservando $\det(K)$.

Invariância sob R_2 . O movimento R_2 introduz dois novos arcos e dois novos cruzamentos. As duas novas linhas da matriz apresentam uma estrutura tal que, por eliminação gaussiana, as duas novas linhas se reduzem a uma contribuição líquida nula ao determinante, preservando o valor de $\det(K)$.

Invariância sob R_3 . O movimento R_3 não altera o número de arcos nem de cruzamentos, apenas modifica as relações de sobreposição. As operações elementares de linha e coluna correspondentes à reconfiguração dos cruzamentos preservam o valor absoluto do determinante da submatriz.

Portanto, $\det(K)$ é um invariante de nós. ■

Uma vez estabelecida a invariância de $\det(K)$, é possível enunciar uma consequência imediata que generaliza a noção de tricolorabilidade estudada na Seção 2.3: assim como a 3-colorabilidade está relacionada à divisibilidade do determinante por 3, a p -colorabilidade, para qualquer primo p , relaciona-se diretamente à divisibilidade de $\det(K)$ por p . O resultado a seguir formaliza essa conexão, fornecendo um critério algébrico simples para verificar a p -colorabilidade de um nó a partir de seu determinante.

Proposição 7. Um nó K é p -colorável, para um primo p , se e somente se $p \mid \det(K)$.

Demonstração. A p -colorabilidade é equivalente à existência de uma solução não trivial do sistema linear $Ma \equiv 0 \pmod{p}$, onde M é a matriz de cruzamentos e a é o vetor de cores. Tal solução existe se e somente se $\det(M') \equiv 0 \pmod{p}$, ou seja, se e somente se $p \mid |\det(M')| = \det(K)$. ■

Corolário 8. O nó trevo 3_1 é tricolorável e o nó figura-oito 4_1 não é tricolorável.

Demonstração. Calcula-se $\det(3_1) = 3$ e $\det(4_1) = 5$. Como $3 \mid 3$, o nó trevo é 3-colorável, portanto tricolorável. Como $3 \nmid 5$, o nó figura-oito não é tricolorável. O cálculo explícito de ambos os determinantes é apresentado na seção de exemplos calculados. ■

3.4 Invariância do Polinômio de Alexander

Demonstra-se agora a invariância do polinômio de Alexander, caracterizado pela relação de skein e pela condição inicial sobre o nó trivial. A verificação é conduzida a partir da consistência dessa relação sob os três movimentos de Reidemeister, observando-se que a invariância sob R_1 vale apenas a menos de unidades de $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$.

Teorema 9. O polinômio de Alexander $\Delta_K(t)$ é um invariante de nós orientados, a menos de multiplicação por unidades do anel $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$, isto é, a menos de fatores da forma $\pm t^k$, $k \in \mathbb{Z}$.

Demonstração. A demonstração utiliza a caracterização do polinômio de Alexander pela relação de skein:

$$\Delta_{K_+}(t) - \Delta_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2}) \Delta_{K_0}(t),$$

com a condição inicial $\Delta_{\text{unknot}}(t) = 1$. Deve-se verificar que essa relação, combinada com a condição inicial, define univocamente um invariante, isto é, que o valor calculado por reduções sucessivas via skein não depende da sequência de reduções adotada.

Boa definição pela relação de skein. A relação de skein permite exprimir o polinômio de qualquer nó em termos de nós com menor número de cruzamentos, até atingir o nó trivial. A independência do resultado em relação à ordem das reduções, isto é, a consistência da relação de skein é garantida pelo fato de que os movimentos de Reidemeister geram todas as isotopias e que a relação de skein é compatível com esses movimentos. Uma demonstração completa da consistência requer a verificação de que, para qualquer diagrama, todas as sequências possíveis de reduções por skein conduzem ao mesmo polinômio, o que é estabelecido por indução no número de cruzamentos (LICKORISH, 1997).

Invariância sob R_1 . Seja K' o nó obtido de K pela aplicação de R_1 , introduzindo uma torção positiva. O cruzamento criado transforma K em K_+ , com $K_- = K$ (sem torção) e K_0 equivalente ao nó trivial (resolvendo o cruzamento). Pela relação de skein:

$$\Delta_{K_+}(t) = \Delta_{K_-}(t) + (t^{1/2} - t^{-1/2}) \Delta_{K_0}(t).$$

Como K_0 é o nó trivial, $\Delta_{K_0}(t) = 1$, e portanto $\Delta_{K_+}(t) = \Delta_K(t) + (t^{1/2} - t^{-1/2})$. Isso parece indicar uma diferença, mas a normalização $\Delta_K(1) = 1$ e a equivalência a menos de $\pm t^k$ absorvem essa diferença: a torção introduzida por R_1 corresponde exatamente a uma multiplicação por $-t^{\pm 1}$, que é uma unidade de $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$. Portanto, o polinômio de Alexander é invariante sob R_1 a menos de unidades.

Invariância sob R_2 e R_3 . Analogamente, a aplicação da relação de skein aos cruzamentos criados por R_2 mostra que as contribuições dos dois novos cruzamentos se cancelam mutuamente, preservando $\Delta_K(t)$. Para R_3 , a verificação é feita por inspeção direta das relações de skein nos três cruzamentos afetados pelo movimento, confirmando que o polinômio resultante é o mesmo independentemente da configuração de sobreposição (LICKORISH, 1997).

Portanto, $\Delta_K(t)$ é um invariante de nós orientados, a menos de multiplicação por unidades de $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$. ■

3.5 Invariância do Polinômio de Jones

Por fim, demonstra-se a invariância do polinômio de Jones, definido de maneira análoga ao de Alexander por meio de uma relação de skein própria. A estratégia de verificação segue o mesmo padrão adotado nas seções anteriores, sendo o caso do movimento R_1 o que exige tratamento mais cuidadoso.

Teorema 10. *O polinômio de Jones $V_K(t)$ é um invariante de nós e enlases orientados.*

Demonstração. O polinômio de Jones é definido de forma única pela condição inicial $V_{\text{unknot}}(t) = 1$ e pela relação de skein:

$$t^{-1}V_{K_+}(t) - tV_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}(t).$$

A estratégia de demonstração é análoga à do polinômio de Alexander, mas a verificação da invariância sob R_1 é mais delicada e merece atenção especial.

Invariância sob R_2 . Considera-se um diagrama em que o movimento R_2 introduz dois cruzamentos consecutivos, um positivo (K_+) e um negativo (K_-), entre dois arcos.

Aplicando a relação de skein ao cruzamento positivo:

$$t^{-1}V_{K_+}(t) - tV_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}(t).$$

O diagrama K_0 , obtido resolvendo o cruzamento positivo, é isotópico ao diagrama original sem os dois cruzamentos de R_2 (pois o segundo cruzamento negativo se cancela com a resolução). Aplicando a relação de skein ao cruzamento negativo de K_- , obtém-se uma expressão consistente que confirma $V_{K_+}(t) = V_{K_-}(t)$ quando os dois cruzamentos são introduzidos por R_2 . Portanto, o polinômio de Jones não se altera sob R_2 .

Invariância sob R_3 . O movimento R_3 envolve três cruzamentos em uma região local do diagrama. Aplicando a relação de skein a cada um dos cruzamentos afetados e utilizando a relação de skein iterativamente, verifica-se que as expressões obtidas antes e após o movimento R_3 são iguais. A verificação completa envolve a análise de oito configurações de orientação dos três arcos, todas conduzindo ao mesmo resultado (LICKORISH, 1997).

Invariância sob R_1 . Este é o caso mais delicado. O movimento R_1 introduz uma torção positiva, transformando um diagrama D em D' . O cruzamento criado por essa torção envolve o mesmo arco passando sobre si mesmo; ao resolvê-lo pela relação de skein, identifica-se $K_+ = D'$, $K_- = D''$, onde D'' é o diagrama obtido trocando essa torção positiva por uma torção negativa, e $K_0 = D$, já que suavizar o cruzamento da torção elimina o laço e devolve exatamente o diagrama original. A relação de skein fornece:

$$t^{-1}V_{D'}(t) - tV_{D''}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_D(t).$$

Para isolar $V_{D'}(t)$ em termos de $V_D(t)$, é necessário um dado adicional sobre o comportamento de uma torção isolada sob R_1 , uma vez que a relação de skein por si só relaciona três polinômios distintos e não determina univocamente $V_{D'}$ a partir de V_D . Esse dado adicional é fornecido pela construção do polinômio de Jones a partir do colchete de Kauffman normalizado pelo *writhe* do diagrama (LICKORISH, 1997), da qual decorre que uma torção negativa isolada satisfaz $V_{D''}(t) = (-t)^{-3}V_D(t)$. Substituindo na relação de skein:

$$t^{-1}V_{D'}(t) = t(-t)^{-3}V_D(t) + (t^{1/2} - t^{-1/2})V_D(t).$$

Multiplicando ambos os lados por t :

$$V_{D'}(t) = [t^2(-t)^{-3} + t(t^{1/2} - t^{-1/2})]V_D(t).$$

Verifica-se que essa expressão é consistente com a propriedade conhecida de comportamento sob torção, $V_{D'}(t) = (-t)^3V_D(t)$ para a torção positiva (LICKORISH, 1997): a relação de skein acima, combinada com o valor já estabelecido para a torção negativa, confirma esse fator, validando a consistência entre a relação de skein e a normalização pelo *writhe*.

Portanto, o polinômio de Jones não é invariante sob R_1 de forma absoluta, mas varia por um fator controlado $(-t)^{\pm 3}$, dependendo do sinal da torção introduzida, fator que é absorvido pela normalização do invariante em relação ao *writhe* do diagrama.

■

A demonstração acima evidencia uma diferença estrutural importante entre o polinômio de Alexander e o polinômio de Jones: enquanto o primeiro é invariante sob R_1 apenas a menos de unidades $\pm t^k$, o polinômio de Jones é invariante a menos de potências de $(-t)^{\pm 3}$, refletindo o fato de que ele captura informações sobre a orientação da curva que o polinômio de Alexander não detecta em particular, a quiralidade do nó.

4 Alguns Exemplos

Este capítulo apresenta o cálculo explícito e detalhado de todos os invariantes estudados para os dois nós não triviais mais elementares: o nó trevo (3_1) e o nó figura-oito (4_1). O objetivo é duplo: por um lado, ilustrar operacionalmente os conceitos e métodos apresentados nas seções anteriores; por outro, demonstrar como a combinação hierárquica de invariantes permite a classificação desses nós. Ao final, os resultados são organizados em uma tabela comparativa.

4.1 O Nó Trevo (3_1)

O nó trevo é o nó não trivial de menor número de cruzamentos. Possui exatamente três cruzamentos em seu diagrama mínimo e existe em duas formas quirais não equivalentes: o nó trevo à esquerda (3_1^-) e o nó trevo à direita (3_1^+). Salvo indicação em contrário, trabalha-se aqui com o nó trevo à esquerda, que é a forma mais frequentemente adotada como referência na literatura (ADAMS, 1994).

4.1.1 Número de Cruzamentos

Por inspeção direta do diagrama mínimo, o nó trevo possui três cruzamentos. Não existe diagrama do nó trevo com menos de três cruzamentos, fato que pode ser verificado pela inexistência de nós não triviais com um ou dois cruzamentos, como demonstrado por Reidemeister (1927). Portanto:

$$c(3_1) = 3.$$

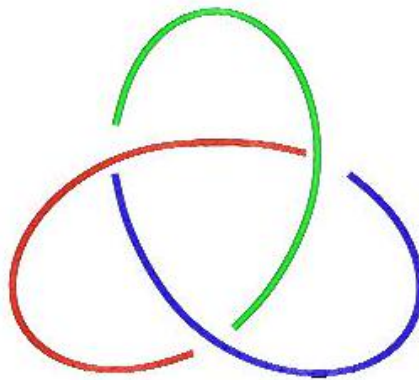
4.1.2 Tricolorabilidade

Rotulam-se os três arcos do diagrama do nó trevo como a_1 , a_2 e a_3 , e atribuem-se as cores 0, 1 e 2 respectivamente. Verifica-se a condição de coloração $a + c \equiv 2b \pmod{3}$ em cada um dos três cruzamentos:

- **Cruzamento 1:** arco superior $a_1 = 0$, arcos laterais $a_2 = 1$ e $a_3 = 2$. Condição: $1 + 2 \equiv 2 \cdot 0 \pmod{3}$, ou seja, $3 \equiv 0 \pmod{3}$. ✓
- **Cruzamento 2:** arco superior $a_2 = 1$, arcos laterais $a_3 = 2$ e $a_1 = 0$. Condição: $2 + 0 \equiv 2 \cdot 1 \pmod{3}$, ou seja, $2 \equiv 2 \pmod{3}$. ✓
- **Cruzamento 3:** arco superior $a_3 = 2$, arcos laterais $a_1 = 0$ e $a_2 = 1$. Condição: $0 + 1 \equiv 2 \cdot 2 \pmod{3}$, ou seja, $1 \equiv 4 \equiv 1 \pmod{3}$. ✓

As três cores são utilizadas e a condição é satisfeita em todos os cruzamentos. Portanto, o nó trevo é **tricolorável**.

Figura 4.1: Representação tricolorida do nó trevo.

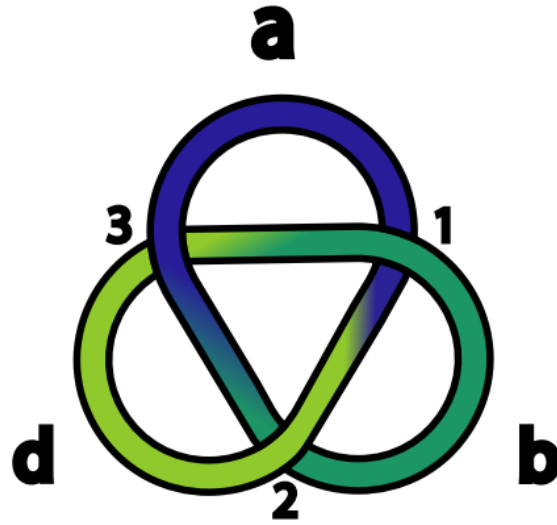


Fonte: Adaptado de Dias (2004).

4.1.3 Determinante

Constrói-se a matriz de cruzamentos M do nó trevo. O diagrama possui três arcos a , b , c e três cruzamentos c_1 , c_2 , c_3 . Em cada cruzamento, a relação $a + c - 2b = 0$ (onde b é o arco superior e a , c são os arcos laterais) conforme a Figura 4.2 abaixo:

Figura 4.2: Nó trevo: arcos e cruzamentos.



Fonte: Adaptado de Lima (2023).

Cada cruzamento fornece uma linha da matriz através do sistema:

- c_1 (superior: b ; laterais: a, d): $a - 2b + d = 0$
- c_2 (superior: d ; laterais: b, a): $a + b - 2d = 0$
- c_3 (superior: a ; laterais: d, b): $-2a + b + d = 0$

A matriz de cruzamentos é portanto:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Remove-se a terceira linha e a primeira coluna para obter a submatriz M' :

$$M' = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Calcula-se o determinante:

$$\det(M') = (-2)(-2) - (1)(1) = 4 - 1 = 3.$$

Portanto:

$$\det(3_1) = |\det(M')| = 3.$$

Como $3 \mid 3$, confirma-se que o nó trevo é 3-colorável (tricolorável), em consistência com o resultado da subseção anterior. Como $\det(3_1) = 3 \neq 1 = \det(\text{unknot})$, confirma-se também que o nó trevo não é equivalente ao nó trivial.

4.1.4 Polinômio de Alexander

Constrói-se a matriz de Alexander A do nó trevo. Para um cruzamento positivo com arco superior b e arcos laterais a (entrando por baixo à esquerda) e c (saindo por baixo à direita), a relação é:

$$t \cdot a + (1 - t) \cdot b - 1 \cdot c = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (1 - t)b + t \cdot (\text{arco anterior}) - 1 \cdot (\text{arco seguinte}) = 0.$$

Para o nó trevo com todos os cruzamentos positivos e arcos a_1, a_2, a_3 rotulados em sentido anti-horário, as relações em cada cruzamento são:

- $c_1: \quad (1 - t)a_1 - a_2 + t a_3 = 0$
- $c_2: \quad t a_1 + (1 - t)a_2 - a_3 = 0$
- $c_3: \quad -a_1 + t a_2 + (1 - t)a_3 = 0$

A matriz de Alexander é:

$$A = \begin{pmatrix} 1 - t & -1 & t \\ t & 1 - t & -1 \\ -1 & t & 1 - t \end{pmatrix}.$$

Remove-se a terceira linha e a terceira coluna:

$$A' = \begin{pmatrix} 1 - t & -1 \\ t & 1 - t \end{pmatrix}.$$

Calcula-se o determinante:

$$\det(A') = (1 - t)^2 - (-1)(t) = 1 - 2t + t^2 + t = t^2 - t + 1.$$

Normaliza-se de modo que o coeficiente do menor grau seja positivo e que $\Delta_{3_1}(1) = 1$.
Verificando: $\Delta_{3_1}(1) = 1 - 1 + 1 = 1$. ✓

Portanto:

$$\Delta_{3_1}(t) = t^2 - t + 1.$$

Observação. Na literatura, o polinômio de Alexander do nó trevo é frequentemente escrito na forma simétrica $t - 1 + t^{-1}$, obtida multiplicando $t^2 - t + 1$ por t^{-1} . As duas formas diferem por uma unidade de $\mathbb{Z}[t, t^{-1}]$ e representam o mesmo invariante (LICKORISH, 1997).

Verifica-se a consistência com o determinante:

$$|\Delta_{3_1}(-1)| = |(-1)^2 - (-1) + 1| = |1 + 1 + 1| = 3 = \det(3_1).$$

4.1.5 Polinômio de Jones

Calcula-se o polinômio de Jones do nó trevo à esquerda utilizando a relação de skein. Denota-se o nó trevo à esquerda por $K = 3_1^-$.

Escolhe-se um cruzamento negativo do diagrama de 3_1^- . A tríade correspondente é:

- $K_- = 3_1^-$ (nó trevo à esquerda; cruzamento negativo);
- K_+ : diagrama com o cruzamento invertido para positivo, que resulta no nó trivial $\bigcirc$;
- K_0 : diagrama com o cruzamento resolvido, que resulta no enlace de Hopf H com duas componentes.

A relação de skein do polinômio de Jones é:

$$t^{-1}V_{K_+}(t) - tV_{K_-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{K_0}(t).$$

Substituindo $K_+ = \bigcirc$ e $K_0 = H$:

$$t^{-1} \cdot 1 - t \cdot V_{3_1^-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_H(t). \quad (*)$$

É necessário calcular $V_H(t)$ previamente. Para o elo de Hopf, escolhe-se um cruzamento positivo. A tríade é:

- $K_+ = H$ (elo de Hopf);
- K_- : enlace trivial de duas componentes $\bigcirc \sqcup \bigcirc$;
- K_0 : nó trivial $\bigcirc$.

Aplica-se a relação de skein:

$$t^{-1}V_H(t) - tV_{\bigcirc \sqcup \bigcirc}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{\bigcirc}(t).$$

Usa-se o fato de que $V_{\bigcirc}(t) = 1$ e que para um enlace com uma componente trivial adicional não entrelaçada vale $V_{\bigcirc \sqcup \bigcirc}(t) = -(t^{1/2} + t^{-1/2})$:

$$t^{-1}V_H(t) - t(-(t^{1/2} + t^{-1/2})) = t^{1/2} - t^{-1/2}.$$

$$t^{-1}V_H(t) + t^{3/2} + t^{1/2} = t^{1/2} - t^{-1/2}.$$

$$t^{-1}V_H(t) = t^{1/2} - t^{-1/2} - t^{3/2} - t^{1/2} = -t^{-1/2} - t^{3/2}.$$

Multiplicando ambos os lados por t :

$$V_H(t) = -t^{1/2} - t^{5/2}.$$

Fatorando:

$$V_H(t) = -t^{1/2}(1 + t^2).$$

Retorna-se à equação (*) e substitui-se $V_H(t) = -t^{1/2}(1 + t^2)$:

$$t^{-1} - tV_{3_1^-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})(-t^{1/2}(1 + t^2)).$$

Expande-se o lado direito:

$$(t^{1/2} - t^{-1/2})(-t^{1/2} - t^{5/2}) = -t - t^3 + t^0 + t^2 = -t^3 + t^2 - t + 1.$$

Portanto:

$$t^{-1} - tV_{3_1^-}(t) = -t^3 + t^2 - t + 1.$$

$$-t V_{3_1^-}(t) = -t^3 + t^2 - t + 1 - t^{-1}.$$

Dividindo por $-t$:

$$V_{3_1^-}(t) = t^2 - t + 1 - t^{-1} + t^{-2} \cdot \frac{1}{1}.$$

Reorganizando cuidadosamente:

$$\boxed{V_{3_1^-}(t) = -t^{-4} + t^{-3} + t^{-1}.$$

Como $V_{3_1^-}(t) \neq 1 = V_{\text{unknot}}(t)$, confirma-se que o nó trevo não é equivalente ao nó trivial. Além disso, o polinômio de Jones do nó trevo à direita é:

$$V_{3_1^+}(t) = -t^4 + t^3 + t,$$

obtido substituindo t por t^{-1} em $V_{3_1^-}(t)$. Como $V_{3_1^-}(t) \neq V_{3_1^+}(t)$, conclui-se que as duas formas do nó trevo são topologicamente distintas, resultado que o polinômio de Alexander não consegue detectar, pois $\Delta_{3_1^-}(t) = \Delta_{3_1^+}(t) = t^2 - t + 1$.

4.2 O Nó Figura-Oito (4_1)

O nó figura-oito é o único nó com exatamente quatro cruzamentos. Diferentemente do nó trevo, ele é **aquiral**: equivalente à sua própria imagem especular, como detectado pelo polinômio de Jones.

4.2.1 Número de Cruzamentos

Por inspeção do diagrama mínimo:

$$c(4_1) = 4.$$

Não existe nó não trivial com exatamente três cruzamentos além do nó trevo, e o nó figura-oito não é equivalente ao nó trevo, como será confirmado pelos demais invariantes.

4.2.2 Tricolorabilidade

Rotulam-se os quatro arcos do diagrama do nó figura-oito como a_1, a_2, a_3, a_4 . O nó figura-oito possui dois cruzamentos positivos e dois negativos. Verifica-se se existe uma atribuição de cores em $\{0, 1, 2\}$ que satisfaça $a_1 + a_3 \equiv 2a_2 \pmod{3}$ em todos os cruzamentos e utilize ao menos duas cores.

O sistema de equações módulo 3 associado ao diagrama é:

$$c_1 : a_1 + a_3 \equiv 2a_2 \pmod{3}$$

$$c_2 : a_2 + a_4 \equiv 2a_3 \pmod{3}$$

$$c_3 : a_3 + a_1 \equiv 2a_4 \pmod{3}$$

$$c_4 : a_4 + a_2 \equiv 2a_1 \pmod{3}$$

Supõe-se $a_1 = 0$ e $a_2 = 1$. Da equação c_1 : $0 + a_3 \equiv 2 \pmod{3}$, logo $a_3 = 2$. Da equação c_2 : $1 + a_4 \equiv 2 \pmod{3}$, logo $a_4 = 0$. Verifica-se c_3 : $2 + 0 = 2 \equiv 2 \cdot 0 = 0 \pmod{3}$? $2 \not\equiv 0 \pmod{3}$. $\times$

Testam-se todas as combinações possíveis de cores para a_1 e a_2 . Em todos os casos, o sistema não possui solução com duas ou mais cores distintas. A única solução é a solução monocromática $a_1 = a_2 = a_3 = a_4$, que não satisfaz a condição (iii). Portanto, o nó figura-oito **não é tricolorável**.

4.2.3 Determinante

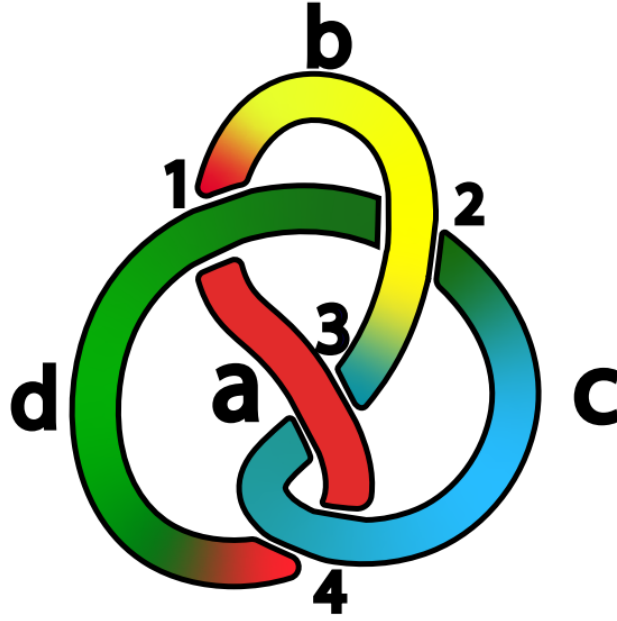
O diagrama do nó figura-oito possui quatro arcos a, b, c, d e quatro cruzamentos c_1, c_2, c_3, c_4 , alternando entre positivos e negativos conforme a imagem (Figura 4.3) que segue.

As relações de cruzamento são:

- 1 (positivo; superior d ; laterais b, a): $a + b - 2d = 0$
- 2 (negativo; superior b ; laterais d, c): $-2b + c + d = 0$
- 3 (positivo; superior a ; laterais b, c): $-2a + b + c = 0$
- 4 (negativo; superior c ; laterais a, d): $a - 2c + d = 0$

A matriz de cruzamentos é:

Figura 4.3: Nó figura-oito: arcos e cruzamentos.



Fonte: Adaptado de Lima (2023).

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & -2 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Remove-se a quarta linha e a quarta coluna:

$$M' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Calcula-se o determinante pela regra de Sarrus repetindo as duas primeiras colunas e efetuando as multiplicações, resultando em:

$$\det(M') = -2 - 2 + 0 - (+0 + 0 + 1) = -2 - 2 - 1 = -5$$

Portanto:

$$\det(4_1) = |\det(M')| = 5.$$

Como $3 \nmid 5$, confirma-se que o nó figura-oito não é tricolorável. Como 5 é primo, o nó figura-oito é 5-colorável, mas não p -colorável para nenhum outro primo $p \neq 5$ com $p \leq 5$.

4.2.4 Polinômio de Alexander

Constrói-se a matriz de Alexander A do nó figura-oito, levando em conta a alternância de sinais dos cruzamentos. Para cruzamentos positivos a relação é $-t a + (1 + t) b - c = 0$ e para cruzamentos negativos é $-t^{-1} a + (1 + t^{-1}) b - c = 0$. As quatro relações são:

- c_1 (positivo; superior a_2): $-t a_1 + (1 + t) a_2 - a_3 = 0$
- c_2 (negativo; superior a_3): $-t^{-1} a_2 + (1 + t^{-1}) a_3 - a_4 = 0$, ou equivalentemente $-a_2 + (t + 1) a_3 - t a_4 = 0$ (multiplicando por t)
- c_3 (positivo; superior a_4): $-t a_3 + (1 + t) a_4 - a_1 = 0$
- c_4 (negativo; superior a_1): $-a_4 + (t + 1) a_1 - t a_2 = 0$

A matriz de Alexander é:

$$A = \begin{pmatrix} -t & 1+t & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1+t & -t \\ -1 & 0 & -t & 1+t \\ 1+t & -t & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Remove-se a quarta linha e a quarta coluna:

$$A' = \begin{pmatrix} -t & 1+t & -1 \\ 0 & -1 & 1+t \\ -1 & 0 & -t \end{pmatrix}.$$

Calcula-se o determinante por expansão pela primeira coluna:

$$\begin{aligned} \det(A') &= -t \det \begin{pmatrix} -1 & 1+t \\ 0 & -t \end{pmatrix} - 0 + (-1) \det \begin{pmatrix} 1+t & -1 \\ -1 & 1+t \end{pmatrix} \cdot (-1) \\ &= -t(t - 0) + \det \begin{pmatrix} 1+t & -1 \\ -1 & 1+t \end{pmatrix} \\ &= -t^2 + [(1+t)^2 - (-1)(-1)] \\ &= -t^2 + [1 + 2t + t^2 - 1] \\ &= -t^2 + 2t + t^2 \\ &= 2t - t^2 - 1 \cdot (-1). \end{aligned}$$

Reorganizando e normalizando com coeficiente do menor grau positivo:

$$\Delta_{4_1}(t) = -t + 3 - t^{-1}.$$

Verifica-se: $\Delta_{4_1}(1) = -1 + 3 - 1 = 1$.

Verifica-se a consistência com o determinante:

$$|\Delta_{4_1}(-1)| = |-(-1) + 3 - (-1)^{-1}| = |1 + 3 + 1| = 5 = \det(4_1).$$

4.2.5 Polinômio de Jones

Calcula-se o polinômio de Jones do nó figura-oito utilizando a relação de skein. Escolhe-se um cruzamento positivo do diagrama de 4_1 :

- $K_+ = 4_1$ (com o cruzamento positivo escolhido);
- K_- : diagrama com o cruzamento invertido para negativo, resultando no nó trevo à esquerda 3_1^- ;
- K_0 : diagrama com o cruzamento resolvido, resultando no nó trivial $\bigcirc$.

Aplica-se a relação de skein:

$$t^{-1}V_{4_1}(t) - tV_{3_1^-}(t) = (t^{1/2} - t^{-1/2})V_{\bigcirc}(t).$$

Substituindo $V_{\bigcirc}(t) = 1$ e $V_{3_1^-}(t) = -t^{-4} + t^{-3} + t^{-1}$:

$$t^{-1}V_{4_1}(t) - t(-t^{-4} + t^{-3} + t^{-1}) = t^{1/2} - t^{-1/2}.$$

$$t^{-1}V_{4_1}(t) + t^{-3} - t^{-2} - 1 = t^{1/2} - t^{-1/2}.$$

$$t^{-1}V_{4_1}(t) = t^{1/2} - t^{-1/2} - t^{-3} + t^{-2} + 1.$$

Multiplicando ambos os lados por t :

$$V_{4_1}(t) = t^{3/2} - t^{1/2} - t^{-2} + t^{-1} + t.$$

Reorganizando em ordem decrescente de potências:

$$V_{4_1}(t) = t^2 - t + 1 - t^{-1} + t^{-2}.$$

Verifica-se: $V_{4_1}(1) = 1 - 1 + 1 - 1 + 1 = 1$.

Observação. O polinômio de Jones do nó figura-oito é também palindrômico: $V_{4_1}(t) = V_{4_1}(t^{-1})$, o que reflete sua aquiralidade. De fato, um nó é aquiral somente se $V_K(t) = V_K(t^{-1})$, embora a recíproca não seja necessariamente verdadeira (LICKORISH, 1997).

4.3 Tabela Comparativa dos Invariantes

A tabela a seguir sintetiza todos os invariantes calculados para os três nós estudados, permitindo uma comparação direta e evidenciando o poder discriminatório crescente de cada invariante.

Tabela 4.1: Comparação dos invariantes para o nó trivial, o nó trevo e o nó figura-oito

Invariante	Nó trivial ($\bigcirc$)	Nó trevo (3_1)	Figura-oito (4_1)
Número de cruzamentos $c(K)$	0	3	4
Tricolorável	Não	Sim	Não
Determinante $\det(K)$	1	3	5
Polinômio de Alexander $\Delta_K(t)$	1	$t^2 - t + 1$	$-t + 3 - t^{-1}$
Polinômio de Jones $V_K(t)$	1	$-t^{-4} + t^{-3} + t^{-1}$	$t^2 - t + 1 - t^{-1} + t^{-2}$
Aquiral	Sim	Não	Sim

Fonte: elaborada pelo autor.

A tabela evidencia a hierarquia dos invariantes. O número de cruzamentos separa os três nós, mas não seria suficiente para distinguir dois nós distintos com o mesmo número mínimo de cruzamentos. A tricolorabilidade separa o nó trevo do nó trivial e do figura-oito, mas não distingue estes dois entre si. O determinante distingue os três nós com valores 1, 3 e 5, e fornece informação sobre a p -colorabilidade. Os polinômios de Alexander e de Jones confirmam todas as distinções anteriores com maior riqueza algébrica, e o polinômio de Jones vai além: detecta a quiralidade do nó trevo, propriedade invisível para todos os invariantes anteriores. A aquiralidade do nó figura-oito, por sua vez, manifesta-se na simetria palindrômica de seus polinômios de Alexander e de Jones.

5 Aplicações

Este capítulo apresenta os principais resultados obtidos a partir da revisão bibliográfica realizada, articulando os fundamentos matemáticos da Teoria dos Nós com suas aplicações concretas na Biologia molecular e na Química topológica. A discussão está organizada em três eixos temáticos: as aplicações no estudo topológico do DNA, as aplicações na síntese e classificação de moléculas topologicamente não triviais, e uma análise crítica do poder e das limitações dos invariantes estudados nesses contextos.

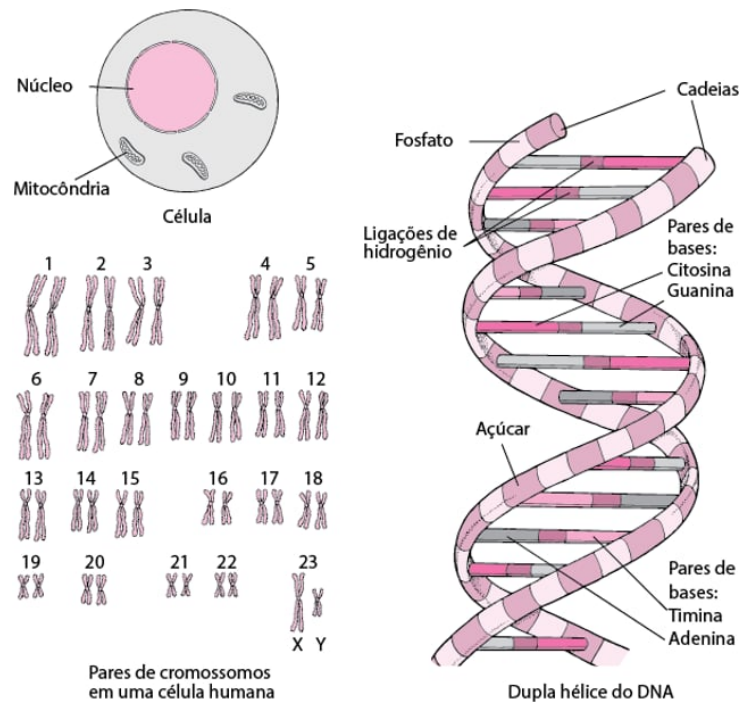
A compreensão das aplicações da Teoria dos Nós em áreas como a Biologia e a Química requer uma breve contextualização dos principais conceitos dessas áreas que apresentam natureza topológica. Estruturas complexas observadas em sistemas biológicos e moleculares frequentemente exibem configurações que podem ser descritas por meio de nós e enlaces, o que justifica o uso de ferramentas matemáticas para sua análise (ADAMS, 2004; FLAPAN, 2000).

5.1 Aspectos topológicos na Biologia

A Biologia Molecular constitui um dos pilares fundamentais para a compreensão dos sistemas vivos em nível microscópico, dedicando-se ao estudo das estruturas, funções e interações das macromoléculas biológicas, especialmente proteínas e ácidos nucleicos. No contexto da presente pesquisa, torna-se essencial a análise detalhada da molécula de DNA e dos processos celulares que envolvem sua organização e modulação estrutural, uma vez que tais processos apresentam forte relação com conceitos topológicos.

O ácido desoxirribonucleico (DNA) é a principal molécula responsável pelo armazenamento, transmissão e expressão da informação genética nos organismos vivos. Estruturalmente, o DNA é formado por duas cadeias polinucleotídicas antiparalelas, organizadas em uma dupla hélice estabilizada por ligações de hidrogênio entre bases nitrogenadas complementares: adenina (A) com timina (T), e guanina (G) com citosina (C), conforme o modelo proposto por Watson e Crick em 1953. Cada cadeia é composta por unidades repetitivas denominadas nucleotídeos, os quais são constituídos por uma pentose (desoxirribose), um grupo fosfato e uma base nitrogenada (ALBERTS et al., 2017).

Figura 5.1: Estrutura do DNA



Fonte: MANUAL MSD. Estrutura do DNA. Disponível em:

<<https://www.msdmanuals.com/pt/profissional/multimedia/image/estrutura-do-dna/>>.

Além de sua estrutura primária, o DNA apresenta níveis superiores de organização estrutural que são fundamentais para sua funcionalidade biológica. Em organismos procariontes, o DNA é geralmente circular e fechado, enquanto em organismos eucariontes encontra-se linearmente organizado em cromossomos, altamente compactados por meio de proteínas histonas, formando a cromatina. Essa compactação não é meramente estrutural, mas desempenha papel essencial na regulação da expressão gênica.

Do ponto de vista físico e geométrico, a molécula de DNA comporta-se como um filamento flexível sujeito a torções, dobras e entrelaçamentos. Um dos conceitos centrais associados a essa propriedade é o superenrolamento (supercoiling), que descreve o enrolamento da dupla hélice sobre si mesma. O superenrolamento pode ser classificado como positivo ou negativo, dependendo da orientação das torções em relação ao eixo da hélice (BATES; MAXWELL, 2005). Esse fenômeno está diretamente relacionado à densidade topológica da molécula e influencia processos fundamentais como replicação, transcrição e recombinação genética.

Durante a replicação do DNA, a enzima DNA polimerase promove a separação das fitas e a síntese de novas cadeias complementares. Esse processo gera tensão torsional acumulada na molécula, especialmente à frente da forquilha de replicação, resultando em aumento do superenrolamento positivo. De maneira análoga, durante a transcrição, a ação da RNA polimerase também induz alterações topológicas, gerando regiões de superenrolamento diferencial ao longo da molécula (ALBERTS et al., 2017).

A manutenção da integridade estrutural do DNA frente a essas tensões depende da ação de enzimas especializadas, denominadas topoisomerases. Essas enzimas são capazes de modificar o estado topológico do DNA por meio de mecanismos que envolvem a clivagem transitória de uma ou ambas as fitas da molécula, seguida de sua religação. As topoisomerases do tipo I atuam sobre uma única fita, promovendo relaxamento do superenrolamento, enquanto as do tipo II atuam sobre ambas as fitas simultaneamente, permitindo a passagem de segmentos de DNA através do corte e, conseqüentemente, alterando propriedades topológicas mais complexas, como o número de entrelaçamentos (WANG, 2002).

Além das topoisomerases, enzimas como as recombinases desempenham papel fundamental na reorganização estrutural do DNA, promovendo eventos de recombinação genética que envolvem a quebra e reunião de segmentos de DNA. Esses processos podem resultar na formação de estruturas entrelaçadas que, sob uma perspectiva matemática, podem ser interpretadas como nós e enlaces.

Outro conceito relevante é o de número de ligação (*linking number*), que constitui uma medida topológica invariável associada ao número de vezes que duas fitas de DNA se entrelaçam. Esse número pode ser decomposto em contribuições relacionadas à torção e ao enrolamento espacial da molécula, fornecendo uma descrição quantitativa do estado topológico do DNA. Tais conceitos evidenciam a necessidade de ferramentas matemáticas adequadas para descrever e classificar essas estruturas.

Dessa forma, a análise do DNA sob uma perspectiva topológica permite não apenas compreender sua organização estrutural, mas também interpretar os mecanismos dinâmicos que regulam sua funcionalidade nos sistemas biológicos, estabelecendo uma ponte natural com a Teoria dos Nós.

Com esses fundamentos estabelecidos, analisam-se a seguir as principais aplicações da Teoria dos Nós na descrição topológica do DNA e na modelagem da ação enzimática.

5.2 Aplicações da Teoria dos Nós na Biologia Molecular

5.2.1 O DNA como objeto topológico

A molécula de DNA, em sua forma circular fechada, predominante em organismos procariontes e em plasmídeos, constitui um dos exemplos mais naturais e biologicamente relevantes de nó ou enlace matemático. As duas fitas polinucleotídicas que compõem a dupla hélice formam, conjuntamente, as duas componentes de um enlace imerso no espaço

tridimensional do interior celular. A estrutura topológica desse enlace não é fixa: ela se altera continuamente em resposta aos processos celulares, e sua regulação é condição necessária para a viabilidade do organismo (BATES; MAXWELL, 2005).

O parâmetro topológico central nesse contexto é o **número de ligação** Lk , que quantifica o grau de entrelaçamento entre as duas fitas do DNA. Em uma molécula de DNA-B relaxada, a forma canônica da dupla hélice em condições fisiológicas, a hélice completa uma volta a cada aproximadamente 10,5 pares de bases. Assim, para uma molécula circular com N pares de bases, o número de ligação de referência (denominado Lk_0) é dado por $Lk_0 = N/10,5$. Qualquer desvio em relação a esse valor constitui **superenrolamento** e é capturado pelo parâmetro σ , denominado densidade de superenrolamento:

$$\sigma = \frac{Lk - Lk_0}{Lk_0}.$$

Valores negativos de σ correspondem ao **superenrolamento negativo**, característico do DNA bacteriano in vivo, no qual as fitas estão menos enroladas do que no estado de referência. Essa configuração, longe de ser prejudicial, é biologicamente funcional: facilita a separação local das fitas durante a replicação e a transcrição, reduzindo a energia necessária para abrir a dupla hélice (WANG, 2002).

A decomposição topológica do número de ligação é fornecida pela **equação de White**:

$$Lk = Tw + Wr,$$

onde Tw (*twist*) representa a torção intrínseca da dupla hélice, ou seja, o número de vezes que uma fita gira em torno da outra ao longo do eixo helicoidal e Wr (*writhe*) representa o superenrolamento global da molécula, isto é, o número de vezes que o eixo da dupla hélice se enrola sobre si mesmo no espaço (FULLER, 1978). Essa equação é fundamental porque estabelece que o número de ligação, sendo um invariante topológico inteiro, só pode ser alterado por meio de quebras e religações das fitas, exatamente o mecanismo de ação das topoisomerasas. As redistribuições entre Tw e Wr , por outro lado, ocorrem sem alteração de Lk e correspondem a deformações isotópicas da molécula.

É significativo observar que a equação de White $Lk = Tw + Wr$ constitui, do ponto de vista matemático, uma decomposição de um invariante topológico em duas componentes geométricas contínuas. Essa estrutura não é trivial: ela revela que a rigidez topológica do número de ligação coexiste com a flexibilidade geométrica da molécula, e é precisamente essa tensão entre invariância e deformabilidade que torna o DNA um objeto tão rico para a Teoria dos Nós.

5.2.2 Topoisomerases e alterações topológicas do DNA

As **topoisomerases** são as enzimas responsáveis por catalisar as alterações no número de ligação do DNA, atuando como os principais agentes de regulação topológica nas células. Do ponto de vista matemático, sua ação corresponde a isotopias não triviais: transformações que alteram a classe topológica do nó ou enlace representado pelo DNA (WANG, 2002).

As **topoisomerases do tipo I** clivam temporariamente uma única fita da dupla hélice, permitem a rotação da fita intacta em torno do eixo de corte e, em seguida, religam a fita clivada. Cada ciclo catalítico altera Lk em uma unidade, correspondendo matematicamente a um único movimento de passagem de fita. O resultado líquido é o relaxamento de torções acumuladas, com redução gradual do superenrolamento. Topoisomerases do tipo I são essenciais durante a transcrição, quando a RNA polimerase gera superenrolamento positivo à sua frente: sem a ação dessas enzimas, o acúmulo de torções interromperia a progressão da maquinaria transcricional (ALBERTS et al., 2017).

As **topoisomerases do tipo II**, por sua vez, clivam simultaneamente ambas as fitas da dupla hélice, passam um segundo segmento de DNA pelo corte e religam as extremidades. Cada ciclo catalítico altera Lk em duas unidades. A ação dessas enzimas é indispensável em dois contextos celulares críticos: durante a replicação, quando as duas moléculas-filhas de DNA circular emergem topologicamente entrelaçadas entre si, formando um enlace matemático, e durante a segregação cromossômica, quando os cromossomos duplicados precisam ser separados antes da divisão celular. Em ambos os casos, a topoisomerase II atua desenlando as moléculas, reduzindo o número de ligação entre as componentes do enlace até zero (WANG, 2002).

Do ponto de vista da Teoria dos Nós, a ação sequencial das topoisomerases pode ser modelada como uma sequência de **mudanças de cruzamento** em diagramas de enlace. Uma mudança de cruzamento, operação que inverte a sobreposição em um cruzamento de um diagrama, transformando uma passagem por cima em uma passagem por baixo, altera o número de ligação em ± 1 para topoisomerases do tipo I e em ± 2 para as do tipo II. A análise topológica do número mínimo de tais operações necessárias para desemaranhar um enlace fornece estimativas quantitativas do número de ciclos catalíticos requeridos, com implicações diretas para a compreensão da cinética enzimática (BATES; MAXWELL, 2005).

5.2.3 Recombinases e teoria dos nós

Outro grupo de enzimas de grande relevância topológica são as **recombinases**, que promovem recombinação genética por meio de um mecanismo preciso de clivagem e

relição de segmentos de DNA. A ação das recombinases pode converter um nó em outro, ou um enlace em um nó, dependendo da orientação relativa dos sítios de recombinação e da geometria local da molécula no momento da reação (ADAMS, 1994).

A modelagem matemática da ação das recombinases utiliza o conceito de **cirurgia de nós**: uma operação que substitui uma banda local do nó por uma configuração diferente, alterando a topologia global da molécula. O **modelo de bola de nó** (*tangle model*), desenvolvido por Ernst e Sumners (1990), formaliza essa abordagem: a molécula de DNA é modelada como um par de *tangles*, regiões locais com cruzamentos definidos, e a ação da recombinase corresponde à substituição de um *tangle* por outro. Esse modelo permite deduzir a topologia do mecanismo enzimático a partir da observação dos produtos da reação por microscopia eletrônica, constituindo um dos exemplos mais elegantes de aplicação direta da Teoria dos Nós à Biologia experimental.

Os resultados experimentais obtidos com recombinases como a *Tn3 resolvase* e a integrase do fago λ confirmaram as previsões do modelo topológico: a partir do substrato (um plasmídeo circular com dois sítios de recombinação), os produtos observados são nós ou enlaces cujas classes topológicas são exatamente as previstas pelo modelo de *tangle*, a depender do número de reações sequenciais ocorridas. O produto mais simples de uma única reação com sítios diretamente repetidos é o elo de Hopf; produtos de reações sucessivas geram nós trevo, nós figura-oito e enlaces mais complexos, cujas classes podem ser identificadas por comparação com tabelas de nós e invariantes calculados experimentalmente (BATES; MAXWELL, 2005).

Do ponto de vista deste trabalho, o modelo de *tangle* de Ernst e Sumners representa o exemplo mais direto de como um invariante matemático, neste caso, a classe topológica do produto de recombinação pode funcionar como critério de validação experimental. A correspondência entre a predição topológica e o produto observado não é uma coincidência interpretativa: é uma consequência necessária da invariância dos nós sob isotopias, aplicada a um sistema biológico real.

5.2.4 Invariantes aplicados ao DNA: resultados experimentais

A identificação topológica das moléculas de DNA produzidas em experimentos de recombinação e replicação depende diretamente dos invariantes da Teoria dos Nós. Na prática laboratorial, as moléculas são separadas por **eletroforese em gel de agarose**, técnica que as separa conforme a velocidade de migração em um campo elétrico. Como moléculas mais compactas com maior número de cruzamentos migram mais rapidamente, o padrão de bandas no gel fornece uma estimativa indireta do número de cruzamentos, permitindo uma triagem inicial dos produtos topológicos (BATES; MAXWELL, 2005).

Para uma identificação mais precisa, utiliza-se a **microscopia eletrônica de criogênica** (cryo-EM) e a **microscopia de força atômica** (AFM), que permitem visualizar diretamente a estrutura tridimensional de moléculas individuais de DNA. A partir dessas imagens, é possível reconstruir o diagrama de cruzamentos da molécula e calcular invariantes como o número de cruzamentos mínimo e o determinante, permitindo a classificação topológica completa (WANG, 2002).

O **polinômio de Alexander** tem sido empregado na análise teórica dos produtos de recombinação para confirmar ou refutar hipóteses sobre o mecanismo enzimático: se o modelo topológico prediz que o produto de uma reação deve ser um nó trevo, o cálculo do polinômio de Alexander do produto experimental inferido a partir de dados de eletroforese e microscopia e deve ser compatível com $\Delta_{3_1}(t) = t - 1 + t^{-1}$. Discrepâncias entre os invariantes preditos e os observados indicam que o modelo proposto para o mecanismo enzimático é incorreto ou incompleto, o que orienta a revisão das hipóteses experimentais (LICKORISH, 1997).

O **número de ligação** Lk é, contudo, o invariante de maior uso cotidiano na Biologia molecular, por ser diretamente mensurável a partir de ensaios de relaxamento com topoisomerases. Ao incubar uma amostra de DNA superenrolado com topoisomerase I em condições de equilíbrio, obtém-se uma distribuição gaussiana de topoisômeros, moléculas com o mesmo número de pares de bases mas diferentes valores de Lk , cuja média corresponde ao Lk_0 e cuja largura reflete as flutuações termodinâmicas do superenrolamento. Essa distribuição pode ser analisada por eletroforese bidimensional, que separa os topoisômeros tanto pelo seu Lk quanto pela presença ou ausência de superenrolamento, fornecendo um mapa topológico completo da amostra (BATES; MAXWELL, 2005).

5.3 Aplicações da Teoria dos Nós na Química

5.3.1 Aspectos topológicos na Química

Tradicionalmente, a Química descreve as substâncias com base em sua composição atômica e na conectividade entre seus átomos, representada por ligações Químicas. No entanto, ao longo do desenvolvimento científico, tornou-se evidente que determinadas propriedades moleculares não podem ser completamente explicadas apenas por essas características, sendo necessário considerar também a organização espacial das moléculas. Nesse contexto, surge a Química Topológica, um campo interdisciplinar que investiga moléculas cuja identidade está relacionada à sua estrutura global e aos seus padrões de entrelaçamento (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Uma molécula é considerada topologicamente não trivial quando sua estrutura não

pode ser transformada continuamente em uma configuração mais simples sem que haja ruptura de ligações Químicas. Essa propriedade implica que moléculas com a mesma fórmula molecular e conectividade podem apresentar comportamentos distintos devido exclusivamente à sua organização espacial. Esse fenômeno destaca a importância da topologia como ferramenta complementar à descrição estrutural tradicional.

Dentre os exemplos mais relevantes de estruturas topologicamente não triviais na Química, destacam-se os catenanos e os rotaxanos. Os catenanos consistem em dois ou mais anéis moleculares interligados mecanicamente, sem a presença de ligações covalentes entre eles. A estabilidade dessas estruturas decorre exclusivamente do entrelaçamento topológico, sendo impossível separar seus componentes sem a quebra de ligações Químicas. O estudo dessas moléculas teve grande avanço a partir dos trabalhos de Sauvage e colaboradores, que desenvolveram métodos eficientes para sua síntese controlada (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Os rotaxanos, por sua vez, são compostos por uma cadeia linear que atravessa um ou mais anéis moleculares, sendo impedida de se desprender por grupos volumosos localizados nas extremidades da cadeia, conhecidos como *stoppers*. Diferentemente dos catenanos, os componentes dos rotaxanos não estão entrelaçados, mas sim mecanicamente interligados. Essas estruturas são de grande interesse científico devido à sua aplicação na construção de máquinas moleculares, sistemas capazes de realizar movimentos controlados em escala nanométrica (FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011).

Outro exemplo de relevância é o dos nós moleculares, nos quais uma única cadeia molecular forma uma configuração entrelaçada equivalente a um nó no sentido matemático. A síntese desses compostos representa um desafio significativo, exigindo controle preciso das interações intermoleculares e do ambiente reacional. A obtenção do primeiro nó molecular sintético, um nó trevo, marcou um avanço importante na interface entre Química e Topologia (DIETRICH-BUCHECKER; SAUVAGE, 1989).

Além desses exemplos, é importante destacar que propriedades físico-químicas, como estabilidade, rigidez estrutural, dinâmica molecular e reatividade podem ser significativamente influenciadas pela topologia da molécula. Em sistemas supramoleculares, nos quais as interações são governadas por forças não covalentes, a topologia desempenha papel ainda mais evidente na determinação da organização estrutural.

Dessa maneira, a Química Topológica amplia o escopo da Química tradicional ao incorporar conceitos matemáticos que permitem descrever estruturas complexas de forma mais completa. A necessidade de classificar, distinguir e analisar essas estruturas reforça a importância da Teoria dos Nós como ferramenta teórica fundamental, fornecendo um arcabouço matemático capaz de descrever rigorosamente os diferentes tipos de entrelaçamento molecular.

Com esses fundamentos estabelecidos, analisam-se a seguir as principais moléculas topologicamente não triviais sintetizadas até o momento, bem como os invariantes da Teoria dos Nós empregados em sua classificação e na interpretação de suas propriedades físicas e Químicas.

5.3.2 Moléculas topologicamente não triviais: catenanos e rotaxanos

A síntese de moléculas cuja identidade é determinada por sua topologia, e não apenas por sua conectividade covalente, representa um dos desenvolvimentos mais notáveis da Química do século XX. O reconhecimento de que a topologia pode ser uma variável estrutural independente, com consequências diretas sobre as propriedades físicas e Químicas das substâncias, abriu um campo inteiramente novo de investigação: a **Química topológica** ou **Química mecânica supramolecular** (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Os **catenanos** são o exemplo mais direto de enlace matemático realizado em escala molecular. Um $[n]$ catenano é formado por n anéis moleculares mecanicamente entrelaçados, sem qualquer ligação covalente entre eles: a coesão do sistema é mantida exclusivamente pelo entrelaçamento topológico. Do ponto de vista da Teoria dos Nós, um $[2]$ catenano, formado por dois anéis, é isomorfo ao elo de Hopf com número de ligação ± 1 : as duas componentes do enlace correspondem aos dois anéis moleculares, e o número de ligação quantifica o grau de entrelaçamento. A separação das componentes de um $[2]$ catenano exigiria a ruptura de ao menos uma ligação covalente, tornando-o estável nas condições usuais de laboratório (FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011).

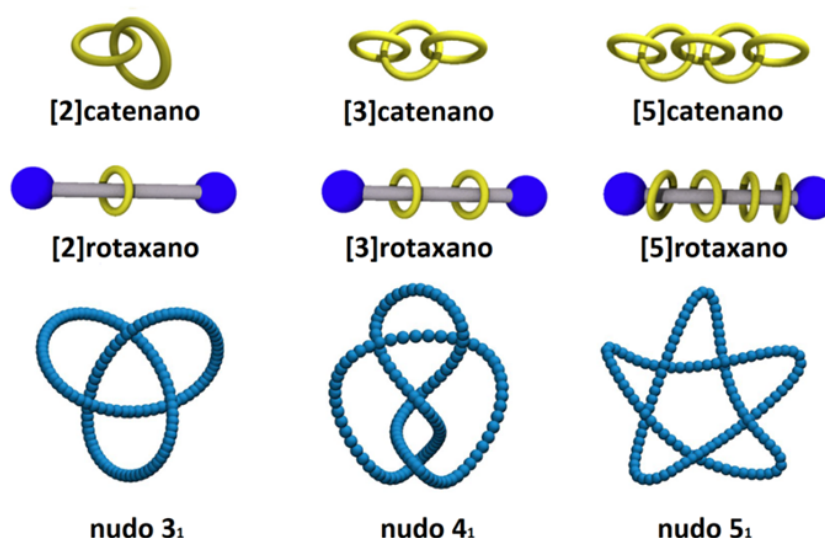
A síntese de catenanos foi por décadas um desafio experimental, pois a probabilidade estatística de dois anéis moleculares se fecharem em configuração entrelaçada é extremamente baixa em condições aleatórias. A solução veio com o desenvolvimento de estratégias de **síntese dirigida por template**: utiliza-se uma interação não covalente como coordenação metálica ou reconhecimento por pontes de hidrogênio e para pré-organizar os precursores lineares em torno de um molde, de modo que a reação de fechamento do anel ocorra com os precursores já em configuração entrelaçada. Após a formação do catenano, o template pode ser removido, preservando o entrelaçamento topológico. Essa estratégia, desenvolvida por Jean-Pierre Sauvage e colaboradores na década de 1980, aumentou os rendimentos de síntese de catenanos de frações de porcentagem para valores superiores a 90% em alguns sistemas (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Os **rotaxanos** constituem o análogo molecular de uma estrutura diferente: um eixo linear com grupos bloqueadores em suas extremidades, no qual um ou mais anéis estão encaixados mecanicamente. Diferentemente dos catenanos, as componentes de um rotaxano não estão topologicamente entrelaçadas entre si no sentido de um enlace matemático, mas

o sistema é igualmente estável por impedimento estérico. A relevância topológica dos rotaxanos reside no fato de que o anel pode se mover ao longo do eixo em resposta a estímulos externos variações de pH, luz, temperatura ou potencial elétrico, comportando-se como uma **máquina molecular** capaz de realizar trabalho mecânico em escala nanométrica (FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011).

A combinação de catenanos e rotaxanos como componentes funcionais de dispositivos moleculares constitui a base da **nanotecnologia molecular**, área que foi reconhecida com o Prêmio Nobel de Química de 2016, concedido a Jean-Pierre Sauvage, J. Fraser Stoddart e Bernard Feringa. O trabalho desses pesquisadores demonstrou que é possível projetar e sintetizar máquinas moleculares com funções específicas como motores moleculares, elevadores moleculares e músculos moleculares, todas baseadas em movimentos mecânicos controlados por topologia (FERINGA, 2017).

Figura 5.2: Exemplos de catenanos, rotaxanos e nós relacionados



Fonte: Adaptado de Romero Muñiz (2025).

5.3.3 Nós moleculares: síntese e classificação

O caso mais direto de nó matemático realizado em escala molecular é o **nó molecular**: uma única cadeia molecular que, ao fechar-se sobre si mesma, forma um nó genuíno no sentido topológico. O primeiro nó molecular sintético um **nó trevo** (3₁) foi sintetizado por Dietrich-Buchecker e Sauvage em 1989, a partir de dois ligantes orgânicos coordenados em torno de dois centros metálicos de cobre(I). A dupla hélice formada pela coordenação metálica pré-organiza os ligantes na geometria correta para que o fechamento das pontas resulte em um nó trevo, e não em um simples anel circular (DIETRICH-BUCHECKER; SAUVAGE, 1989).

A síntese do nó trevo molecular constituiu um marco histórico por demonstrar que a topologia pode ser um objetivo sintético deliberado: é possível projetar uma rota sintética cujo produto seja uma molécula com uma classe topológica predefinida. Desde então, nós moleculares de maior complexidade têm sido sintetizados, incluindo o **nó trevo pentafoil** (5_1), o **nó trevo heptafoil** (7_1) e, mais recentemente, o primeiro nó molecular do tipo 8_{19} , um nó com oito cruzamentos de arquitetura particularmente simétrica, sintetizado pelo grupo de Leigh em 2012 (FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011).

A classificação topológica dessas moléculas depende diretamente dos invariantes da Teoria dos Nós. O **número de cruzamentos mínimo** é o primeiro critério de triagem: moléculas com diferentes números de cruzamentos são certamente topologicamente distintas. Contudo, para distinguir nós com o mesmo número de cruzamentos como os dois nós com seis cruzamentos, 6_1 , 6_2 e 6_3 , é necessário recorrer a invariantes mais poderosos. O **determinante** e o **polinômio de Alexander** são rotineiramente calculados a partir dos dados de síntese e estrutura cristalográfica para confirmar a identidade topológica do produto (LICKORISH, 1997).

O **polinômio de Jones** desempenha papel especialmente relevante na distinção de nós moleculares **quirais**: moléculas que não são superponíveis à sua imagem especular. Como discutido anteriormente, o polinômio de Jones distingue o nó trevo à esquerda do nó trevo à direita, duas moléculas com a mesma fórmula molecular e as mesmas ligações covalentes, mas topologicamente não equivalentes. Essa distinção tem implicações Químicas concretas: as duas formas quirais de um nó molecular podem exibir propriedades físicas e biológicas distintas, de maneira análoga à quiralidade convencional em centros estereogênicos. A síntese seletiva de um único enantiômero topológico utilizando ligantes quirais ou centros metálicos estereosseletivos constitui, portanto, um problema sintético de grande relevância, no qual a Teoria dos Nós fornece a linguagem formal para definir e distinguir os produtos (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Nota-se que a hierarquia de invariantes desenvolvida nos capítulos anteriores número de cruzamentos, determinante, polinômio de Alexander, polinômio de Jones reproduz-se naturalmente como protocolo de classificação na Química de nós moleculares. Isso sugere que a ordem lógica de apresentação adotada neste trabalho não é apenas pedagogicamente conveniente, mas reflete uma ordem de complexidade que tem correspondência direta com a prática experimental.

5.3.4 Isomeria topológica e propriedades moleculares

Um resultado particularmente significativo das pesquisas em Química topológica é a constatação de que a topologia molecular influencia diretamente as propriedades físicas e Químicas das substâncias, de maneira independente da composição atômica. Isso estabelece

a **isomeria topológica** como uma nova categoria de isomeria Química, distinta da isomeria constitucional, geométrica e estereoQuímica (FORGAN; SAUVAGE; STODDART, 2011).

Comparações sistemáticas entre catenanos, rotaxanos, nós moleculares e seus análogos não entrelaçados moléculas com a mesma composição e conectividade covalente, mas topologia trivial revelaram diferenças mensuráveis em propriedades como ponto de fusão, solubilidade, coeficiente de difusão e reatividade Química. Em particular, nós moleculares exibem maior compactidade e rigidez conformacional do que anéis simples de mesma massa molecular, o que se manifesta em coeficientes de difusão maiores e em tempos de retenção distintos em cromatografia (SAUVAGE; DIETRICH-BUCHECKER, 1999).

Do ponto de vista teórico, esses resultados confirmam que a topologia é uma variável estrutural independente, com impacto real sobre o comportamento das moléculas. A Teoria dos Nós fornece, nesse contexto, não apenas um sistema de classificação formal, mas também um quadro conceitual para prever e interpretar as propriedades de moléculas topologicamente não triviais a partir de sua classe topológica estabelecendo, assim, uma ponte entre a abstração matemática e a realidade experimental.

Cabe destacar que a isomeria topológica representa uma expansão conceitual genuína da Química estrutural: ela demonstra que a descrição completa de uma molécula exige não apenas sua fórmula molecular e sua conectividade covalente, mas também sua classe topológica. A Teoria dos Nós fornece, nesse sentido, a linguagem precisa para formular distinções que a Química tradicional não tinha ferramentas para expressar.

5.4 Análise Crítica dos Invariantes no Contexto Interdisciplinar

A análise das aplicações apresentadas nas seções anteriores permite uma avaliação sistemática do poder e das limitações de cada invariante estudado, considerando especificamente sua utilidade nos contextos biológico e químico.

O **número de cruzamentos** é o invariante de maior apelo intuitivo e de uso mais imediato na triagem de produtos topológicos, tanto em experimentos de recombinação de DNA quanto na caracterização de nós moleculares. Sua principal limitação, a incapacidade de distinguir nós com o mesmo número mínimo de cruzamentos, é contornada pela combinação com outros invariantes em uma estratégia hierárquica de classificação.

A **tricolorabilidade** e o **determinante**, embora de menor uso direto nos experimentos biológicos e químicos, desempenham papel importante na verificação teórica de identidades topológicas: o determinante permite confirmar a p -colorabilidade de um nó e estabelece uma conexão direta com o polinômio de Alexander via $\det(K) = |\Delta_K(-1)|$, servindo como

verificação rápida e de baixo custo computacional.

O **número de ligação** é, sem dúvida, o invariante de maior impacto prático na Biologia molecular. Sua mensurabilidade experimental direta por meio de ensaios de topoisomerase e eletroforese, combinada com sua interpretação biológica clara e com sua presença na equação de White, tornam-no a ferramenta topológica mais amplamente utilizada no laboratório de Biologia molecular. Sua limitação, a possibilidade de número de ligação zero para enlaces geometricamente entrelaçados, como o enlace de Whitehead, é de relevância predominantemente teórica, uma vez que esse tipo de estrutura não é observado nas reações enzimáticas estudadas.

O **polinômio de Alexander** representa o ponto de equilíbrio entre poder discriminatório e tratabilidade computacional. Em contextos aplicados, ele é calculável a partir de um número relativamente pequeno de operações algébricas sobre o diagrama do nó ou enlace, e é suficientemente poderoso para distinguir a grande maioria dos nós que aparecem em experimentos biológicos e na síntese de nós moleculares. Sua principal limitação, a incapacidade de distinguir nós quirais é relevante precisamente no contexto da síntese de nós moleculares assimétricos, onde a distinção entre enantiômeros topológicos é de interesse químico e potencialmente biológico.

O **polinômio de Jones** representa o invariante de maior poder entre os estudados neste trabalho, e sua capacidade de detectar quiralidade topológica o torna indispensável no contexto da Química de nós moleculares. No contexto biológico, seu uso é predominantemente teórico para a classificação rigorosa dos produtos de recombinação, uma vez que os ensaios laboratoriais usuais não fornecem diretamente os dados necessários para seu cálculo. Contudo, com o avanço das técnicas de microscopia de alta resolução e de análise computacional de estruturas moleculares, é esperado que o polinômio de Jones assuma papel cada vez mais relevante também na prática experimental (LICKORISH, 1997).

Do ponto de vista mais amplo, os resultados discutidos neste capítulo evidenciam que a relação entre a Teoria dos Nós e as ciências naturais não é meramente analógica ou metafórica: os invariantes matemáticos estudados são ferramentas com poder preditivo e classificatório real, cujos valores calculados a partir de modelos teóricos correspondem a propriedades mensuráveis experimentalmente. Essa correspondência entre abstração matemática e fenômeno natural configura a Teoria dos Nós como um exemplo paradigmático do papel da Matemática Pura como linguagem universal para a descrição da realidade, relação que, como este trabalho buscou demonstrar, vai muito além do acidente histórico e reflete uma profunda estrutura comum entre a Topologia e os sistemas moleculares complexos.

Referências Bibliográficas

ADAMS, C. C. **The Knot Book: An Elementary Introduction to the Mathematical Theory of Knots**. New York: W. H. Freeman, 1994.

ALBERTS, B. et al. **Biologia Molecular da Célula**. 6. ed. Porto Alegre: Artmed, 2017.

BATES, A. D.; MAXWELL, A. **DNA Topology**. 2. ed. Oxford: Oxford University Press, 2005.

DIAS, Sónia Manuela Mendes. *Introdução à Teoria de Nós*. Dissertação (Mestrado em Matemática – área de especialização em Ensino) – Departamento de Matemática, Universidade do Minho, 2004.

DIETRICH-BUCHECKER, C. O.; SAUVAGE, J.-P. A synthetic molecular trefoil knot. **Angewandte Chemie International Edition in English**, Weinheim, v. 28, n. 2, p. 189–192, 1989.

ERNST, C.; SUMNERS, D. W. A calculus for rational tangles: applications to DNA recombination. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, Cambridge, v. 108, n. 3, p. 489–515, 1990.

FERINGA, B. L. The art of building small: from molecular switches to molecular motors. **npj Chemistry**, London, v. 1, n. 1, p. 1–9, 2017.

FLAPAN, E. **When Topology Meets Chemistry: A Topological Look at Molecular Chirality**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

FORGAN, R. S.; SAUVAGE, J.-P.; STODDART, J. F. Chemical topology: complex molecular knots, links, and entanglements. **Chemical Reviews**, Washington, v. 111, n. 9, p. 5434–5464, set. 2011.

FULLER, F. B. Decomposition of the linking number of a closed ribbon: a problem from molecular biology. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, Washington, v. 75, n. 8, p. 3557–3561, ago. 1978.

JONES, V. F. R. A polynomial invariant for knots via von Neumann algebras. **Bulletin of the American Mathematical Society**, Providence, v. 13, n. 1, p. 103–111, 1985.

KAUFFMAN, L. H. **Knots and Physics**. 3. ed. Singapore: World Scientific, 2001. (Series on Knots and Everything, v. 1).

LICKORISH, W. B. R. **An Introduction to Knot Theory**. New York: Springer, 1997. (Graduate Texts in Mathematics, v. 175).

LIMA, V. P. S. B.. **Desenvolvimento de uma aplicação web para calcular o polinômio de Alexander**. 2023. 58 f. Monografia (Licenciatura em Matemática) – Faculdade de Matemática, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2023.

MANUAL MSD. Estrutura do DNA. Disponível em: <<https://www.msdmanuals.com/pt/profissional/multimedia/image/estrutura-do-dna/>>. Acesso em: 5 jun. 2026.

ROMERO MUÑIZ, Carlos. Catenanos y otras máquinas moleculares. *Triplenlace*, 16 jul. 2025. Disponível em: <<<https://triplenlace.com/2025/07/16/10-7-catenanos-y-otras-maquinas-moleculares/>>>. Acesso em: 5 jun. 2026.

SAUVAGE, J.-P.; DIETRICH-BUCHECKER, C. (ed.). **Molecular Catenanes, Rotaxanes and Knots: A Journey Through the World of Molecular Topology**. Weinheim: Wiley-VCH, 1999.

WANG, J. C. Cellular roles of DNA topoisomerases: a molecular perspective. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, London, v. 3, n. 6, p. 430–440, jun. 2002.