

O PAPEL DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA QUÍMICA: INOVAÇÃO, ÉTICA E DESAFIOS PARA A FORMAÇÃO DOCENTE – UM ESTUDO DE CASO DO NONILFENOL

THE ROLE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN CHEMISTRY: INNOVATION, ETHICS, AND CHALLENGES FOR TEACHER EDUCATION – A CASE STUDY OF NONYLPHENOL

EL PAPEL DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN LA QUÍMICA: INNOVACIÓN, ÉTICA Y DESAFÍOS PARA LA FORMACIÓN DOCENTE – UN ESTUDIO DE CASO DEL NONILFENOL

Fernanda Eloisy da Rosa¹

Flávio Tajima Barbosa²

Resumo

A Inteligência Artificial (IA) tem se consolidado como uma das principais inovações tecnológicas do século presente, tendo impacto significativo na pesquisa científica, nos processos industriais e no ensino. Na área da química, essa ferramenta tem possibilitado avanços na previsão de propriedades moleculares, na avaliação de toxicidade e no desenvolvimento de rotas sintéticas mais eficientes. Contudo, a incorporação dessas tecnologias suscita importantes reflexões éticas, especialmente no que tange aos impactos socioambientais e à promoção de um raciocínio científico ético, crítico e humanizado. Diante desse cenário, o presente artigo tem como objetivo analisar o papel da Inteligência Artificial na Química, considerando seu potencial de inovação e os desafios éticos que emergem de seu uso, articulando essa discussão à formação docente, por meio de um estudo de caso de natureza didático-teórica do nonilfenol, composto amplamente utilizado como tensoativo e reconhecido como disruptor endócrino. Metodologicamente, trata-se de uma pesquisa de natureza qualitativa, de caráter bibliográfico e exploratório. Os resultados indicam que o uso crítico da IA pode contribuir tanto para a compreensão de problemas químicos complexos quanto para o desenvolvimento de uma consciência ética e comprometida com a responsabilidade socioambiental e regulatória no âmbito da formação docente.

Palavras-chave: inteligência artificial; ensino de química; ética científica; nonilfenol; consciência socioambiental.

Abstract

Artificial Intelligence (AI) has consolidated itself as one of the main technological innovations of the present century, having a significant impact on scientific research, industrial processes, and education. In the field of Chemistry, this tool enables advances in the prediction of molecular properties, toxicity assessment, and the development of more efficient synthetic routes. However, the incorporation of these technologies raises important ethical reflections, especially with regard to socio-environmental impacts and the promotion of ethical, critical, and humanized scientific reasoning. In this context, the present article aims to analyze the role of Artificial Intelligence in Chemistry, considering its innovative potential and the ethical challenges that emerge from its use, articulating this discussion with teacher education through a didactic-theoretical case study of nonylphenol, a compound widely used as a surfactant and recognized as an endocrine disruptor. Methodologically, this is a qualitative study of a bibliographic and exploratory nature. The results indicate that the critical use of AI can contribute both to the understanding of complex chemical problems and to the development of ethical awareness committed to socio-environmental and regulatory responsibility within the scope of teacher education.

Keywords: artificial intelligence; chemistry education; scientific ethics; nonylphenol; socio-environmental and regulatory responsibility.

¹ Licencianda em Química no Centro Universitário Internacional - UNINTER.

² Professor no Centro Universitário Internacional - UNINTER.

Resumen

La Inteligencia Artificial (IA) se ha consolidado como una de las principales innovaciones tecnológicas del siglo presente, teniendo un impacto significativo en la investigación científica, los procesos industriales y la educación. En el área de la Química, esta herramienta posibilita avances en la predicción de propiedades moleculares, la evaluación de la toxicidad y el desarrollo de rutas sintéticas más eficientes. No obstante, la incorporación de estas tecnologías suscita importantes reflexiones éticas, especialmente en lo que respecta a los impactos socioambientales y a la promoción de un razonamiento científico ético, crítico y humanizado. En este contexto, el presente artículo tiene como objetivo analizar el papel de la Inteligencia Artificial en la Química, considerando su potencial de innovación y los desafíos éticos que emergen de su uso, articulando esta discusión con la formación docente, a través de un estudio de caso didáctico-teórico del nonilfenol, un compuesto ampliamente utilizado como tensioactivo y reconocido como disruptor endocrino. Metodológicamente, se trata de una investigación de naturaleza cualitativa, de carácter bibliográfico y exploratorio. Los resultados indican que el uso crítico de la IA puede contribuir tanto a la comprensión de problemas químicos complejos como al desarrollo de una conciencia ética comprometida con la responsabilidad socioambiental y regulatoria en el ámbito de la formación docente.

Palabras clave: inteligencia artificial; enseñanza de la química; ética científica; nonilfenol; responsabilidad socioambiental y regulatoria.

1 Introdução

Nas últimas décadas, a ciência incorporou avanços tecnológicos de forma exponencial, com destaque para a Inteligência Artificial (IA), que vem provocando impactos significativos na pesquisa, no ensino e nas aplicações industriais (Almeida Neto, 2024). No campo da Química, esses efeitos são particularmente evidentes: algoritmos de aprendizado de máquina, redes neurais e modelos preditivos têm sido empregados para antecipar propriedades moleculares, prever reatividade, avaliar a viabilidade de rotas sintéticas e sugerir novas moléculas com potencial farmacológico ou industrial (Segler *et al.*, 2018).

Essa integração entre IA e Química tem acelerado a descoberta de novos materiais e compostos (Almeida Neto, 2024), permitindo explorar caminhos antes limitados pela experimentação laboratorial e por altos custos financeiros (Candido, 2023). Apesar dos avanços, a incorporação da IA na prática científica também levanta questões éticas, epistemológicas e pedagógicas relacionadas ao uso responsável da tecnologia, à validação do conhecimento produzido e aos impactos socioambientais decorrentes de suas aplicações.

Nesse cenário, emergem importantes desafios éticos associados ao uso da Inteligência Artificial na Química, tais como a confiabilidade e validação dos dados gerados, o risco de uso acrítico de respostas automatizadas e o deslocamento da autoria e da responsabilidade científica, fenômeno discutido no contexto da ciência orientada por dados e da automação do conhecimento científico, conforme citam Spiess e Mattedi (2024) e Negri (2023). Tais aspectos reforçam a necessidade de uma mediação docente consciente, que promova o uso da IA como ferramenta de apoio ao raciocínio científico, e não como substituta do pensamento crítico.

Diante do exposto, esse trabalho propõe-se a analisar o papel da Inteligência Artificial na Química, considerando seu potencial de inovação e os desafios éticos que emergem de seu uso, articulando essa discussão à formação docente, por meio de um estudo de caso do nonilfenol, composto amplamente utilizado como tensoativo e reconhecido como disruptor endócrino.

2 Inteligência artificial e química

2.1 O pensamento científico e a inteligência artificial

A história da ciência é marcada por uma intrínseca relação entre o desenvolvimento do conhecimento e as ferramentas necessárias à construção do saber. As revoluções científicas mais disruptivas são majoritariamente marcadas pelo advento de novas ferramentas, como citam Schleder e Fazzio:

O efeito de uma revolução impulsionada por conceitos é explicar coisas antigas de novas maneiras. O efeito de uma revolução impulsionada por ferramentas é descobrir coisas novas que precisam ser explicadas (Schleder; Fazzio, 2021, p. 26).

Em outras palavras, à medida que as ferramentas científicas evoluem, o modo de fazer ciência evolui, revolucionando o próprio método científico. Da observação empírica e experimental, passamos à era teórica e, depois, à era computacional. Nas últimas décadas, o crescimento do volume de dados e da capacidade de processamento inaugurou o quarto paradigma da ciência, a chamada ciência orientada por dados (Schleder; Fazzio, 2021).

Nesse contexto, surge a Inteligência Artificial (IA), que utiliza algoritmos *de machine learning* e *deep learning* para reconhecer padrões, prever propriedades e até gerar novas soluções para os antigos problemas da ciência. Mais do que uma ferramenta, a IA representa uma nova forma de pensar e produzir conhecimento (Schleder; Fazzio, 2021).

Essa reconfiguração da ciência amplia significativamente o alcance e a velocidade das descobertas químicas, ao mesmo tempo em que introduz novas camadas de complexidade ética epistemológica; em que medida a IA pode ser responsabilizada pela construção de hipóteses e a previsão de propriedades? Ainda não é possível mensurar em sua totalidade, mas é certo que essa transformação já começou (Spiess; Mattedi, 2024).

2.2 As aplicações da IA na área da química e seus desafios

No campo da Química, essa transformação no pensamento científico é particularmente evidente: algoritmos de aprendizado de máquina, redes neurais e modelos preditivos podem

antecipar propriedades moleculares, prever reatividade, avaliar a viabilidade de rotas sintéticas e sugerir novas moléculas com potencial farmacológico ou industrial (Segler, 2018). Tudo isso com menor custo e menor necessidade de experimentação laboratorial (Candido, 2023). Apesar da ampla aplicação da IA na química, ela suscita algumas preocupações, como a violação de privacidade, a desinformação e a proteção de propriedade intelectual (Mendonça Filho, 2024).

O uso inadequado de bases de dados pode facilitar a síntese de substâncias perigosas (Mendonça Filho, 2024) ou violar direitos industriais (Negri, 2023), sendo essencial que cientistas e educadores compreendam não apenas o potencial da IA, mas também as responsabilidades associadas ao seu uso, uma vez que o ensino desempenha papel central na construção de uma consciência científica crítica.

Nesse sentido, a ética química não se limita ao cumprimento de normas, mas envolve uma reflexão sobre suas consequências sociais e ambientais (Rozentalski; Porto, 2021). Discutir o papel da IA na Química é, portanto, também discutir o tipo de ciência e de sociedade que se deseja construir.

3 Um caso real: o nonilfenol

Após discutir o papel da Inteligência Artificial na reconfiguração do pensamento científico e seus desafios éticos, torna-se necessário ancorar essa reflexão em uma problemática concreta da Química contemporânea. Para melhor explorar os desafios e potencialidades do uso da IA na química, nesse trabalho, utilizamos o caso do nonilfenol, composto amplamente utilizado em surfactantes, tintas etc. (Teixeira, 2015), reconhecido disruptor endócrino, com efeitos prejudiciais à saúde humana e aos ecossistemas (Caramés, 2011).

Um disruptor endócrino pode ser definido como uma substância que pode atuar mimetizando ou bloqueando a ação de hormônios naturais, em especial o estrogênio. Os disruptores endócrinos agem alterando a fisiologia de organismos aquáticos, o que pode acarretar na feminilização de peixes, redução da capacidade reprodutiva e impactos na dinâmica populacional de espécies. Ademais, há evidências de possíveis efeitos adversos à saúde humana, incluindo distúrbios endócrinos e riscos associados ao desenvolvimento de determinadas patologias, como redução da quantidade de esperma, puberdade precoce, leucemia, aumento da incidência de câncer de mama, de testículo e de próstata e, a endometriose (Bila; Dezotti, 2007)

O nonilfenol, em temperatura ambiente, é um líquido espesso e amarelado com um leve odor fenólico. Utilizado na fabricação de aditivos de óleo, surfactantes, preparações fungicidas e

plásticos e borracha (PubChem, 2025). A produção mundial anual de NPEs (nonilfenol, nonilfenol etoxilado e seus derivados) foi de cerca de 520.000 toneladas em 1995, e a demanda aumenta anualmente (Mao *et al.*, 2012). Trata-se, portanto, de um composto utilizado em escala global.

Um dos usos mais notáveis do nonilfenol é como tensoativo; isso é, com função de reduzir a tensão superficial entre líquidos ou entre líquido e sólido (Rosen, 2012). Os tensoativos estão entre os produtos mais versáteis da indústria química. São usados em produtos de limpeza, cosméticos e cuidados pessoais, na indústria têxtil e de papel, em agroquímicos, na indústria química e processos industriais e, também, em alimentos e produtos farmacêuticos como emulsificantes e agentes de controle de espuma.

Um relatório, lançado em agosto de 2011 pelo Greenpeace, mostra que NPE's foram encontrados na água de lavagem de roupas e calçados de marcas mundialmente conhecidas (Teixeira, 2015). Durante a investigação, a ONG adquiriu e analisou 78 peças de roupas e calçados de 15 marcas conhecidas: Abercrombie&Fitch, Adidas, Calvin Klein, Converse, GAP, G-Star RAW, H&M, Kappa, Lacoste, Li Ning, Nike, Puma, RalphLauren, Uniqlo e Youngor. Os NPE's foram encontrados em peças vendidas por 14 das 15 marcas testadas, sendo a GAP a única exceção à pesquisa.

Os resíduos de produtos químicos utilizados na fabricação da matéria têxtil permanecem no produto final, o que significa que posteriormente a aquisição do item de vestuário e a sua lavagem, tais resíduos químicos serão lançados em rios, lagos e mares, continuando a poluição já existente feita pelos fabricantes (Teixeira, 2015).

Em 2005, uma diretiva europeia proibiu a venda de produtos com mais de 0,1% de nonilfenol polietoxilado e nonilfenol (Diretiva 2003/53/CE) (Caramés, 2007). Apesar disso, o nonilfenol está entre as substâncias com atividades estrogênicas fora da legislação brasileira para águas superficiais, conforme Resolução nº 357/2005 do CONAMA.

Sendo essa substância um reconhecido disruptor endócrino, seria de grande importância a criação de um sistema de monitoramento sobre a presença das mesmas nos efluentes domésticos e industriais (Vidor, 2015).

A remoção desses compostos é realizada atualmente por meio da clarificação em águas naturais, mas esse método mostra-se insuficiente para a eliminação efetiva, sendo necessário técnicas complementares de tratamento (Maia, 2020). Outra via de degradação dos NP's é a biodegradação, no entanto, por ser altamente tóxico para alguns organismos, faz-se necessário mais pesquisas para avaliar a sua degradabilidade e estabelecer procedimentos (Mao *et al.*, 2012).

Diante desse cenário, a substituição no nonilfenol por alternativas menos nocivas, o desenvolvimento de métodos de degradação e o fortalecimento dos marcos regulatórios configuram uma densa e complexa problemática (Bila; Dezotti, 2007; Mao *et al.*, 2012), que carece de abordagens integradas entre tecnologia, ciência e ética.

A problemática dos poluentes emergentes, como o nonilfenol, exemplifica desafios contemporâneos da Química que extrapolam os limites dos conteúdos tradicionalmente abordados em sala de aula. Embora conceitos clássicos como estrutura molecular, propriedades físico-químicas, reatividade e processos de degradação continuem centrais no ensino da disciplina, a complexidade desses contaminantes demanda abordagens que integrem novas ferramentas de análise, modelagem e tomada de decisão (Candido; Loguercio, 2023). Nesse sentido, a Inteligência Artificial surge como uma tecnologia contemporânea capaz de ampliar o olhar sobre problemas químicos atuais, sem substituir o conhecimento tradicional, mas ressignificando sua aplicação (Schleder; Fazzio, 2021). Assim, articular poluentes emergentes e ferramentas digitais no ensino de Química constitui uma estratégia pedagógica para aproximar a formação científica escolar das demandas reais da sociedade contemporânea.

3.1 Uso da IA em problemas reais: uma abordagem pedagógica

Frente aos desafios enfrentados pela química com o caso do nonilfenol, a IA emerge como uma alternativa capaz de propor recursos educacionais inovadores (Almeida Neto, 2024), aliando inovação científica, técnica, ética e formação docente. Dessa forma, a Inteligência Artificial contribui ao ampliar a capacidade de análise de dados, simulação de cenários e avaliação de impactos (Segler *et al.*, 2018).

Nesse sentido, surgem algumas possíveis aplicações da IA; a modelagem computacional de produtos e substâncias alternativas ao nonilfenol; a predição de toxicidade, possibilitando a avaliação prévia dos riscos associados a esses compostos; e o auxílio no desenvolvimento e na otimização de técnicas de degradação química e biológica, voltadas à mitigação de impactos ambientais.

Desse modo, propõe-se uma abordagem pedagógica respaldada na Base Nacional Comum Curricular (BNCC), documento norteador da Educação Básica no Brasil, que enfatiza a articulação entre conhecimentos científicos, tecnológicos e sociais, favorecendo práticas que promovem o pensamento crítico e a tomada de decisão responsável. Considerando que a formação docente assume papel essencial na mediação entre inovação tecnológica e consciência

ética (Zaterka; Mocellin, 2024), propõe-se o desenvolvimento de um estudo de caso de natureza didático-teórica a ser realizado em sala com os alunos, em grupo.

A proposta tem como finalidade desenvolver a Competência Específica 3 da área de Ciências da Natureza para o Ensino Médio da BNCC:

Investigar situações-problema e avaliar aplicações do conhecimento científico e tecnológico e suas implicações no mundo, utilizando procedimentos e linguagens próprios das Ciências da Natureza, para propor soluções que considerem demandas locais, regionais e/ou globais, e comunicar suas descobertas e conclusões a públicos variados, em diversos contextos e por meio de diferentes mídias e tecnologias digitais de informação e comunicação (TDIC).

Por meio dessa, acredita-se poder trabalhar muitas das habilidades da BNCC para essa competência, em especial as habilidades 1 a 7, com enfoque para a habilidade 6. (EM13CNT306): Avaliar os riscos envolvidos em atividades cotidianas, aplicando conhecimentos das Ciências da Natureza, para justificar o uso de equipamentos e recursos, bem como comportamentos de segurança, visando à integridade física, individual e coletiva, e socioambiental, podendo fazer uso de dispositivos e aplicativos digitais que viabilizem a estruturação de simulações de tais riscos.

O Quadro 1 - Sequência pedagógica investigativa com uso de IA, apresenta a organização das etapas de condução da proposta pedagógica, evidenciando os momentos de contextualização, investigação, análise crítica e reflexão ética, em consonância com as orientações da BNCC e com a necessidade de uma formação científica responsável frente ao uso de tecnologias emergentes.

Quadro 1: Sequência pedagógica investigativa com uso de IA

Momento da proposta	Descrição das atividades	Recursos utilizados	Aspectos discutidos / objetivos pedagógicos
1. Contextualização	Apresentação da problemática do uso do nonilfenol na indústria química, destacando seus impactos, bem como o papel da IA na previsão de riscos e proposição de alternativas químicas.	Aula expositiva, mediação docente	Disruptores endócrinos; dualidade do uso da IA; relação ciência–sociedade
2. Organização da investigação	Formação de grupos de estudantes e apresentação da proposta de investigação colaborativa, com orientação sobre o uso responsável de ferramentas digitais e de IA.	Roteiro da atividade, orientação.	Trabalho colaborativo; ética no uso de tecnologias digitais
3. Pesquisa com uso de IA e ferramentas	Cada grupo utiliza sistemas de IA generativa para investigar	ChatGPT, Gemini, Manus; PubChem,	Aplicações da IA na Química; análise de

químicas digitais	formulações de tensoativos, identificando o uso de nonilfenol e derivados etoxilados, além de possíveis rotas de degradação e substitutos sustentáveis.	etc.	dados; inovação científica
4. Análise crítica e validação das informações	Comparação dos resultados obtidos entre os grupos, discussão das divergências e avaliação da confiabilidade das respostas geradas pela IA.	Quadro, debate mediado	Limitações e incertezas da IA; necessidade de validação científica
5. Síntese e reflexão ética	Elaboração de uma síntese pelos grupos, contemplando os resultados da investigação e uma reflexão sobre a responsabilidade científica no uso da IA em contextos ambientais.	Relatório, mapa mental ou apresentação	Responsabilidade científica; impactos sociais e ambientais
6. Fechamento expositivo dialogado e consolidação	Exposição dialogada conduzida pelo professor, retomando os principais resultados da investigação realizada pelos grupos e problematizando o papel da IA no ensino de Química, enfatizando seu uso como ferramenta de apoio à aprendizagem crítica e reflexiva.	Exposição oral mediada pelo professor, questionamentos orientadores	Ética pedagógica; formação crítica; mediação docente

Fonte: elaborado pelos autores (2025)

A sequência pedagógica apresentada no Quadro 1 foi estruturada de modo a promover uma articulação progressiva entre contextualização científica, investigação mediada por tecnologias digitais, análise crítica das informações e reflexão ética, elementos considerados fundamentais para uma formação científica contemporânea e socialmente responsável, tal como defendem Zabala (1998) e Delizoicov *et al.* (2002). Tal organização dialoga com concepções de ensino investigativo, nas quais o estudante assume papel ativo na construção do conhecimento, mediado pela ação docente e pelo uso intencional de recursos tecnológicos, conforme discutido por Silva (2008) e Borges (2002), em consonância com a perspectiva ciência, tecnologia e sociedade no ensino de Ciências (Auler; Bazzo, 2001).

O primeiro momento, de contextualização, tem como objetivo introduzir a problemática do nonilfenol a partir de uma situação real, evidenciando seus impactos ambientais e à saúde humana. A escolha desse composto não é aleatória, uma vez que os disruptores endócrinos configuram exemplos emblemáticos de como decisões tecnológicas e industriais podem gerar consequências socioambientais complexas (Bila; Dezotti, 2007). Ao associar esse conteúdo ao papel da Inteligência Artificial na previsão de riscos e na proposição de alternativas químicas, busca-se ampliar a compreensão dos estudantes acerca da dualidade do uso da tecnologia, destacando tanto seu potencial inovador quanto seus limites éticos. Essa prática busca que os

estudantes desenvolvam a compreensão da ciência como uma prática não somente técnica, mas que é atravessada por dimensões éticas e ambientais (López; Cerezo, 1996; Azevedo *et al.*, 2021).

No segundo momento, voltado à organização da investigação, a formação de grupos e a orientação sobre o uso responsável de ferramentas digitais e de Inteligência Artificial visam desenvolver competências relacionadas ao trabalho colaborativo e à ética no uso da informação. Conforme apontam Schleder e Fazzio (2021), a ciência contemporânea é marcada pelo uso intensivo de dados e algoritmos, o que exige que os estudantes compreendam não apenas os resultados produzidos por essas ferramentas, mas também os critérios de validação e as responsabilidades associadas ao seu uso.

A etapa de pesquisa com uso de IA e ferramentas químicas digitais constitui o núcleo investigativo da proposta. Nesse momento, os estudantes são incentivados a explorar sistemas de IA generativa e bases de dados químicas, como PubChem e plataformas de modelagem computacional, para identificar formulações que utilizam nonilfenol, bem como possíveis rotas de degradação e alternativas menos nocivas. Essa abordagem dialoga com estudos que apontam a Inteligência Artificial como uma ferramenta promissora na predição de propriedades moleculares e na avaliação de toxicidade, reduzindo custos experimentais e ampliando o escopo das investigações químicas (Segler *et al.*, 2018; Candido; Loguercio, 2023).

Contudo, reconhecendo as limitações e incertezas inerentes às respostas geradas por sistemas de IA, o quarto momento da sequência dedica-se à análise crítica e à validação das informações obtidas. A comparação entre os resultados dos diferentes grupos e a discussão mediada pelo professor permitem problematizar a confiabilidade dos dados, reforçando a necessidade de confrontar as informações com fontes científicas consolidadas. Tal etapa é fundamental para evitar a compreensão acrítica da tecnologia e para promover um raciocínio científico ético e reflexivo (Rozentaliski; Porto, 2021).

A síntese e a reflexão ética, propostas no quinto momento, buscam consolidar os conhecimentos construídos ao longo da investigação, estimulando os estudantes a refletirem sobre a responsabilidade científica no uso da Inteligência Artificial em contextos ambientais. Ao analisar coletivamente os impactos sociais, ambientais e regulatórios associados ao uso do nonilfenol, os estudantes são levados a compreender a química como uma prática socialmente situada, cujas decisões extrapolam o âmbito técnico (Azevedo *et al.*, 2021).

Por fim, o fechamento expositivo dialogado tem como função integrar os principais resultados da investigação, retomando os conceitos científicos, tecnológicos e éticos discutidos ao longo da sequência. Nessa etapa, a mediação docente assume papel central, ao problematizar

o uso da Inteligência Artificial no ensino de Química como uma ferramenta de apoio à aprendizagem crítica, e não como substituta do pensamento científico.

A sequência pedagógica proposta dialoga diretamente com a Competência Específica 3 da área de Ciências da Natureza da BNCC, especialmente com a habilidade *EMI3CNT306*, ao incentivar a avaliação de riscos envolvidos em atividades e produtos químicos, bem como o uso de recursos digitais para a simulação e análise desses riscos. Dessa forma, a proposta contribui para o desenvolvimento de competências que articulam conhecimento científico, tomada de decisão responsável e consciência socioambiental, alinhando-se às demandas contemporâneas da formação docente em Química.

Assim, o uso pedagógico da inteligência artificial, associado à discussão sobre o nonilfenol, possibilita ao estudante compreender não apenas os aspectos técnicos envolvidos, mas também refletir criticamente sobre os limites, responsabilidades e implicações éticas do uso de tecnologias emergentes, em consonância com as orientações da BNCC.

4 Conclusões

A Inteligência Artificial tem se consolidado como um elemento transformador no campo da Química, não apenas por ampliar as possibilidades de investigação científica e inovação tecnológica, mas também por suscitar reflexões éticas, socioambientais e regulatórias inerentes à prática científica contemporânea. Ao permitir a modelagem molecular, a predição de toxicidade e a simulação de rotas de degradação, a IA inaugura novas formas de produzir conhecimento, alinhadas ao paradigma da ciência orientada por dados, ao mesmo tempo em que impõe desafios relacionados à responsabilidade no uso da informação e à validação dos resultados obtidos.

O estudo de caso do nonilfenol mostrou-se particularmente relevante para evidenciar essas tensões. Trata-se de uma substância amplamente empregada em processos industriais, apesar de seus reconhecidos impactos à saúde humana e aos ecossistemas. As lacunas regulatórias existentes, especialmente no contexto brasileiro, reforçam a necessidade de abordagens integradas que articulem ciência, tecnologia, ética e legislação. Nesse cenário, a IA surge como uma ferramenta potencial para apoiar tanto a identificação de alternativas menos nocivas quanto o desenvolvimento de estratégias mais eficientes de degradação e monitoramento ambiental, desde que seu uso seja orientado por critérios éticos e científicos rigorosos.

No âmbito educacional, o trabalho destaca que a incorporação da IA ao ensino de Química não deve ser compreendida apenas como a adoção de novas tecnologias, mas como

uma oportunidade para promover um raciocínio científico ético, crítico e humanizado. Em sala de aula, esses aspectos podem ser desenvolvidos por meio da mediação docente intencional, da problematização de situações reais e da condução de atividades investigativas que incentivem os estudantes a questionar, validar e interpretar criticamente as informações fornecidas por ferramentas de IA.

Ao articular uma problemática contemporânea da Química, representada pelos poluentes emergentes, com o uso de uma ferramenta igualmente contemporânea, a Inteligência Artificial, evidencia-se que a inovação no ensino não implica o abandono dos fundamentos clássicos da disciplina. Pelo contrário, o enfrentamento de desafios atuais exige a mobilização desses conhecimentos tradicionais em novos contextos, mediados por tecnologias digitais e por uma postura ética e crítica do docente. Dessa forma, o ensino de Química pode se manter fiel à sua base conceitual, ao mesmo tempo em que se atualiza frente às demandas científicas, ambientais e sociais do século XXI.

A proposta pedagógica apresentada, alinhada à Base Nacional Comum Curricular, evidencia que o uso de estudos de caso reais, aliado a ferramentas digitais e à investigação colaborativa, pode favorecer a construção de aprendizagens significativas, contextualizadas e socialmente responsáveis. Ao analisar coletivamente as limitações e implicações éticas do uso da IA em problemas ambientais, como o caso do nonilfenol, os estudantes são estimulados a desenvolver autonomia intelectual, responsabilidade científica e sensibilidade às dimensões humanas e sociais da prática química.

Nesse sentido, a Inteligência Artificial, quando integrada de maneira crítica e reflexiva ao ensino de Química, possui potencial para contribuir simultaneamente para a inovação científica e para a formação de sujeitos capazes de compreender e intervir nos desafios complexos que envolvem ciência, tecnologia, meio ambiente e sociedade. Ao articular o caso do nonilfenol com o uso educativo da IA, este trabalho reforça a importância de uma educação científica comprometida com a responsabilidade socioambiental e regulatória, apontando para a necessidade de novas pesquisas e práticas pedagógicas que aprofundem essa integração no contexto da formação docente.

Dessa forma, evidencia-se que a formação docente em Química deve incorporar criticamente o uso da Inteligência Artificial, capacitando o professor a mediar aprendizagens que articulem conhecimento científico, responsabilidade ética e compromisso social, em consonância com as demandas contemporâneas da educação e da ciência.

Referências

- ALMEIDA NETO, R. A. *et al.* Integração da inteligência artificial na educação em química: desenvolvimento e avaliação de uma ferramenta interativa sob a perspectiva de teorias do desenvolvimento cognitivo. **Caderno Pedagógico**, v. 21, n. 4, p. e3606, 2024. DOI: <https://doi.org/10.54033/cadpedv21n4-034>. Disponível em: <https://ojs.studiespublicacoes.com.br/ojs/index.php/cadped/article/view/3606>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- AULER, D.; BAZZO, W. A. Reflexões para a Implementação do Movimento CTS no Contexto Educacional Brasileiro. **Ciência & Educação**, v. 7, n. 1, p. 1-13, 2001. Disponível em: [doi.org](https://doi.org/10.1590/S1516-73132001000100001). Acesso em: 10 jun. 2026. DOI: <https://doi.org/10.1590/S1516-73132001000100001>. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ciedu/a/wJMcpHfLgzh53wZrByRpmkd/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- AZEVEDO, D.; PIETRICOSKI, L. B.; DELLA JUSTINA, L. A. Proposta de uma sequência didática sobre o tema câncer para o ensino fundamental: possibilidades e limites. **Revista Valore**, v. 6, p. 460-470, 2021. DOI: [10.22408/reva602021765](https://doi.org/10.22408/reva602021765). Disponível em: <https://revistavalore.emnuvens.com.br/valore/article/download/823/574>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- BILA, D. M.; DEZOTTI, M. Desreguladores endócrinos no meio ambiente: efeitos e consequências. **Química Nova**, v. 30, n. 3, p. 651–666, 2007. DOI: [10.1590/S0100-40422007000300027](https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000300027). Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/KCQTSdVJXckXnHh7dTVyxnn/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- BORGES, A. T. Novos rumos para o laboratório escolar de ciências. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 19, n. 3, p. 291-313, 2002. DOI: [10.5007/2175-7941.2002v19n3p291](https://doi.org/10.5007/2175-7941.2002v19n3p291). Disponível em: <https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/6607>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- BRASIL. Ministério da Educação. **Base Nacional Comum Curricular**. Brasília: MEC, 2018. Disponível em: <https://basenacionalcomum.mec.gov.br/>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- CANDIDO, J. G. de; LOGUERCIO, R. de Q. Haverá espaço para o humano na era da química in silico? **Química Nova**, v. 46, n. 10, p. 1031–1039, 2023. DOI: [10.21577/0100-4042.20170461](https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170461). Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/M4WVbdLPhLkhYfCgd6nhQsP/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 10 jun. 2026.
- CARAMÉS, D. M. Implicancias del uso de nonoxinol en el Uruguay. **INNOTECH**, n. 2 ene-dic, p. 10-11, 2007. DOI: <https://doi.org/10.26461/02.03>. Disponível em: https://ojs.latu.org.uy/index.php/INNOTECH/pt_BR/article/view/17. Acesso em: 10 jun. 2026.
- DELIZOICOV, D.; ANGOTTI, J. A.; PERNAMBUCO, M. M. **Ensino de ciências: fundamentos e métodos**. São Paulo: Cortez, 2002. 364 p.

LÓPEZ, J. L. L.; CERESO, J. A. L. Educación CTS en acción: enseñanza secundaria y universidad. In: GARCIA, M. I. G.; CERESO, J. A. L.; LOPEZ, J. L. (orgs.). **Ciencia, tecnología y sociedad: una introducción al estudio social de la ciencia y la tecnología**. Madrid: Editorial Tecnos, 1996. p. 225-252.

MAIA, A. C. B. L. **Regime de responsabilidade pelos danos causados pelos contaminantes emergentes como risco do desenvolvimento**. 2020. Dissertação (Mestrado em Direito) – Instituto CEUB de Pesquisa e Desenvolvimento, Centro Universitário de Brasília, Brasília, 2020. Disponível em: <https://repositorio.uniceub.br/jspui/bitstream/prefix/15085/1/61700059.pdf>. Acesso em: 10 jun. 2026.

MAO, B. *et al.* Occurrence and biodegradation of nonylphenol in the environment. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 13, n. 1, p. 491–505, 2012. DOI: 10.3390/ijms13010491. Disponível em: <https://www.mdpi.com/1422-0067/13/1/491>. Acesso em: 10 jun. 2026.

MARQUES, V. C. **Inteligência artificial generativa e a educação infantil: proposta de uma abordagem metodológica com os contextos investigativos**. 2025. Tese (Doutorado em Educação) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2025. Disponível em: <https://repositorio.unicamp.br/acervo/detalhe/1500884>. Acesso em: 10 jun. 2026.

MENDONÇA FILHO, L. G. de. **Utilização eficaz de ferramentas de inteligência artificial (IA) para identificar ameaças químicas, biológicas, radiológicas e nucleares (QBRN) emergentes, contribuindo para a garantia da segurança nacional**. 2024. Dissertação (Curso de Altos Estudos de Política e Estratégia) – Escola Superior de Guerra, Rio de Janeiro, 2024. Disponível em: <https://repositorio.esg.br/bitstream/123456789/2050/1/CAEPE.49%202024%20TCC%20VC%20assinado.pdf>. Acesso em: 10 jun. 2026.

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. **PubChem Compound Summary for CID 67296: Nonylphenol**. Bethesda: NCBI, 2025. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Nonylphenol>. Acesso em: 28 out. 2025.

NEGRI, A. L. **Inteligência artificial no Brasil: uma análise sob a perspectiva dos direitos humanos e do desenvolvimento socioambiental**. 2023. Dissertação (Mestrado em Direito Econômico e Socioambiental) – Escola de Direito, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, Curitiba, 2023.

ROSEN, M. J.; KUNJAPPU, J. T. **Surfactants and interfacial phenomena**. 4. ed. Hoboken: Wiley, 2012. DOI: 10.1002/9781118228920. Disponível em: <https://download.e-bookshelf.de/download/0000/5942/86/L-G-0000594286-0002364626.pdf>. Acesso em: 10 jun. 2026.

ROZENTALSKI, E. F.; PORTO, P. A. A ética química e seu ensino a estudantes de química. **Química Nova**, v. 44, n. 9, p. 1210–1218, 2021. DOI: 10.21577/0100-4042.20170768. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/FZ3jXmy4nvyn4R33jcZG98m/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 10 jun. 2026.

SCHLEDER, G. R.; FAZZIO, A. Machine learning na física, química e ciência de materiais: descoberta e design de materiais. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 43, p. e20200407, 2021. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2020-0407. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/rbef/a/qzcfSKw4nzBK5Mddr8ZXy4v/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 10 jun. 2026.

SEGLER, M. H. S.; PREUSS, M.; WALLER, M. P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI. **Nature**, v. 555, n. 7698, p. 604–610, 2018. DOI: 10.1038/nature25978. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/29595767/>. Acesso em: 10 jun. 2026.

SILVA, D. R. **Resolver problemas a partir de uma proposta pedagógica contextualizada com a realidade dos alunos**: uma possibilidade para o ensino de ciências. 2008. Dissertação (Mestrado em Educação em Ciências) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/17350/000715429.pdf?sequence=1>. Acesso em: 10 jun. 2026.

SPIESS, M. R.; MATTEDI, M. A. Do laboratório ao data center: reconfigurando a atividade científica por meio da inteligência artificial. **Cadernos de Ciência & Tecnologia**, v. 41, p. e27357, 2024. DOI: 10.35977/0104-1096.cct2024.v41.27357. Disponível em: <https://apct.sede.embrapa.br/cct/article/view/27357>. Acesso em: 10 jun. 2026.

TEIXEIRA, L. L. F. **O impacto das substâncias danosas da química têxtil na sociedade**: um estudo de caso. 2015. Monografia (Curso Superior de Tecnologia em Produção Têxtil) – Faculdade de Tecnologia de Americana, Americana, 2015.

VIDOR, T. F. **Utilização de teste in vivo para análise de presença de substâncias com potencial de desregulação endócrina em efluente de indústria metalúrgica**. 2015. Dissertação (Mestrado em Engenharia e Ciências Ambientais) – Universidade de Caxias do Sul, Caxias do Sul, 2015. Disponível em: <https://repositorio.ucs.br/server/api/core/bitstreams/07a9a201-5226-4884-9dca-81a359737fa6/content>. Acesso em: 10 jun. 2026.

ZABALA, A. **A Prática Educativa**: como educar. Porto Alegre: Artmed, 1998.

ZATERKA, L.; MOCELLIN, R. A química como parte da cultura: uma reflexão filosófica acerca da imprevisibilidade, da temporalidade e da capilarização socioambiental das entidades químicas. **Revista da Sociedade Brasileira de Ensino de Química**, v. 5, n. 1, p. e052423, 2024. DOI: 10.4322/resbeq.2024.e052423. Disponível em: <https://revista.sbenq.org.br/index.php/rsbenq/article/view/174>. Acesso em: 10 jun. 2026.

Data de submissão: 05/01/2026

Data de aceite: 03/06/2026