

Desde a descoberta da molécula C_{60} em 1985 a pesquisa básica em fullerenos tem sido muito intensa, especialmente nos últimos anos. Estes novos materiais baseados no átomo de carbono representam a terceira forma que ele adota na natureza, além do grafite e do diamante. Eles possuem características físico-químicas muito interessantes do ponto de vista de possíveis aplicações técnico-industriais a curto prazo. A família dos fullerenos se apresenta em formato de moléculas quase esféricas, em nanotúbulos, e nos endofullerenos, com estrutura de cebolas. As fases cristalinas, descobertas mais recentemente, exibem propriedades muito notáveis do ponto de vista científico. Neste trabalho descrevemos geometricamente a molécula de carbono-60 ou "buckyball." Fazemos uso das propriedades de simetria com teoria de grupos para classificar as configurações eletrônicas e vibracionais. Estes resultados serão exibidos usando visualização gráfica num microcomputador. Todo este material está sendo preparado para usar na caracterização da correlação eletrônica do composto supercondutor K_3C_{60} na segunda fase deste projeto. (financiamento Programa Institucional CNPq/UFRGS. 93/94)