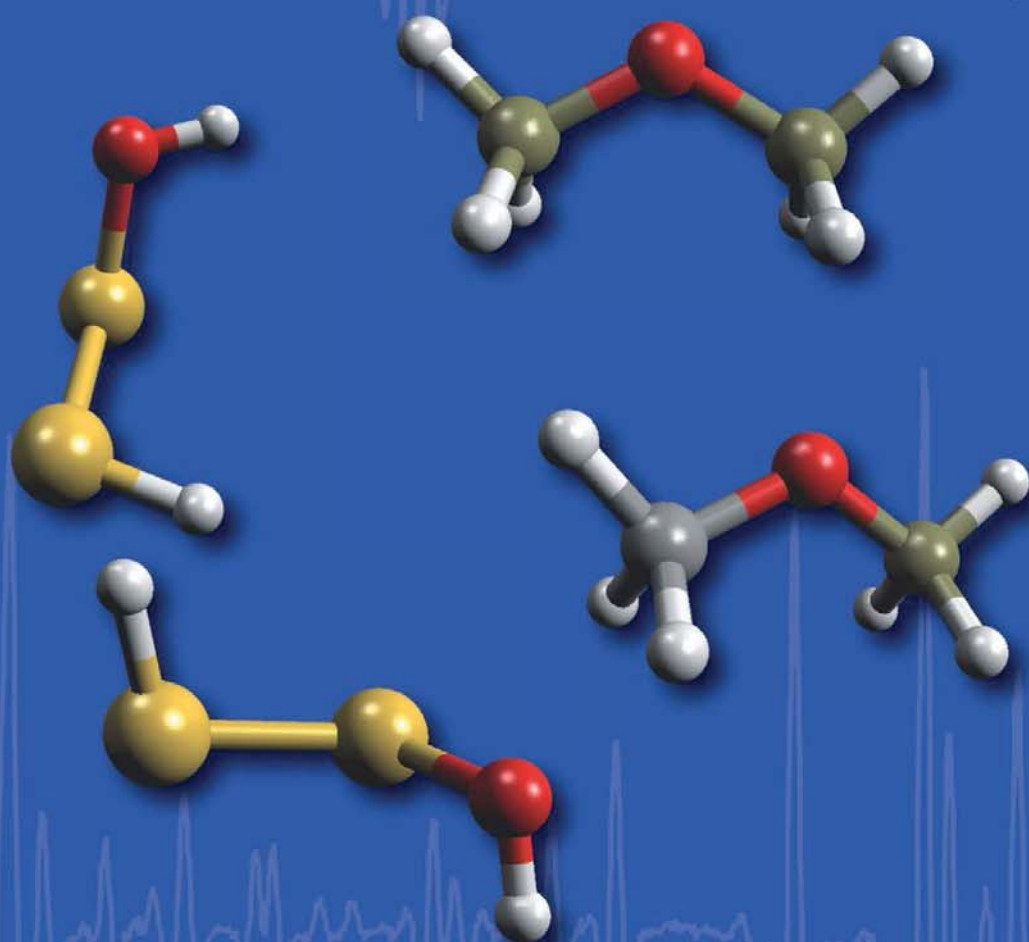


Monika Koerber

The rotational spectrum of
oxatrisulfane and
dimethyl ether ^{13}C -isotopologues



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag



The rotational spectrum of oxatrisulfane and dimethyl ether ^{13}C -isotopologues





The rotational spectrum of
oxatrisulfane and
dimethyl ether ^{13}C -isotopologues

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität zu Köln

vorgelegt von

MONIKA KOERBER

aus Köln



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2013

Zugl.: Köln, Univ., Diss., 2012

978-3-95404-452-8

I. Berichterstatter:

Professor Dr. Stephan Schlemmer

II. Berichterstatter:

Professor Dr. Thomas F. Giesen

Tag der mündlichen Prüfung:

12.11.2012

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2013

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2013

Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-95404-452-8



In physics, you don't have to go around
making trouble for yourself –
nature does it for you.

Frank Wilczek (*1951)





Abstract

In the course of this thesis, two different molecular species have been studied. Both are connected to different aspects of rotational spectroscopy regarding the challenges in the investigation as well as the scientific questions. Oxatrisulfane (HSSOH) is a molecule of chemical interest with the focus on obtaining the geometric structure and the stability of possible configurations of oxasulfanes. Since it is a very reactive molecular species, which is not stable even under laboratory conditions, the production of oxatrisulfane is the bottleneck to a spectroscopic investigation. Königshofen *et al.*¹ synthesized HSSOH via flash vacuum pyrolysis of the precursor molecule *tert*-butylthiosulfinic acid *S-tert*-butylester. In the work presented here, the pyrolysis conditions have been investigated in detail to optimize the synthesis of oxatrisulfane. Among a large number of additional byproducts, two conformeric structures of 1-oxatrisulfane, *trans*- and *cis*-HSSOH, have been unequivocally identified by their rotational spectrum for the first time. The detailed analysis of the rotational spectrum given in this thesis yields spectroscopic parameters that are in excellent agreement with the results of latest high-level *ab initio* calculations. The *trans* conformer was found to be slightly more stable than the *cis* configuration of 1-oxatrisulfane.

The second molecular species investigated in the course of this thesis, the ¹³C-isotopologues of dimethyl ether (¹³CH₃O¹²CH₃ and (¹³CH₃)₂O), are stable molecules, but the analysis of their rotational spectrum is challenging due to large amplitude motions of the two methyl groups. The development of spectroscopic models for molecules undergoing internal rotation is still ongoing, involving combined theoretical and experimental efforts. In the course of this thesis, rotational-torsional transitions within the vibrational ground state have been recorded for both ¹³C-isotopologues of dimethyl ether, covering a broad spectral region from millimeter to sub-mm wavelengths. Employing the Effective Rotational HAMiltonian ERHAM by P. Groner, the spectra of both isotopologues have been reproduced within their experimental uncertainties. A second theoretical model, BELGI-Cs2tops, which has only recently been developed by I. Kleiner *et al.*, has been tested to analyze the ground-state spectrum of ¹³CH₃O¹²CH₃. Due to the large barriers to torsion in dimethyl ether, this analysis suffers from strong correlation of the spectroscopic parameters in this model. Significant improvement is expected, when torsional excited states are included in the analysis.

In addition, isotopologues of dimethyl ether are of strong astronomical interest. The identification of new complex molecules in the interstellar medium is hampered by the huge number of spectral features in molecular line surveys. However, a large fraction of the observed transitions belongs to a limited number of prominent molecules like dimethyl ether, which show strong and dense spectra and thus cover the spectral features of other molecules. Therefore, also precise predictions for the spectrum of isotopologues of these prominent species are essential to overcome the line confusion, and to enable the detection of more exotic species in the interstellar medium.

Furthermore, the relative isotopic abundance ratios of molecular species in the interstellar medium can contain information on their formation processes. These ratios are important pieces in the big puzzle of astrochemical networks which aim towards the understanding of the evolution of star-forming regions.

Based on the analysis performed with ERHAM, accurate predictions of transition frequencies and intensities for the vibrational ground state of ¹³CH₃O¹²CH₃ and (¹³CH₃)₂O

¹Königshofen *et al.* *Z. Anorg. Allg. Chem.* **625**, 1779–1786 (1999)



have been provided for astronomical application. These data are an important contribution for future astronomical observations performed with the latest generation of instruments like the Atacama Large Millimeter Array (ALMA). The predictions already led to the first interstellar detection of $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ in a survey of the star-forming region G327.3–0.6 performed with the Atacama Pathfinder Experiment (APEX).



Kurzzusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei unterschiedliche Molekülarten untersucht. Beide Projekte sind mit unterschiedlichen Aspekten der Rotationsspektroskopie verknüpft, sowohl im Bezug auf die Herausforderungen in der Untersuchung dieser Systeme, als auch bezogen auf die wissenschaftlichen Fragestellungen. Oxatrisulfan (HSSOH) ist von chemischem Interesse, wobei hier die Bestimmung der geometrischen Struktur von besonderer Bedeutung ist, sowie die Untersuchung der Stabilität verschiedener möglicher Konfigurationen von Oxasulfanen. Da Oxasulfane sehr reaktiv und selbst unter Laborbedingungen nicht stabil sind, ist ihre Herstellung die kritische Hürde zu einer spektroskopischen Untersuchung. Königshofen *et al.*² synthetisierte HSSOH durch flash vacuum Pyrolyse des Ausgangsmoleküls *tert*-Butylthiosulfinsäure *S-tert*-butylester. Die Pyrolysebedingungen wurden im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit genauer untersucht und für die Synthese von Oxatrisulfan optimiert. Unter einer großen Zahl an Nebenprodukten der Pyrolyse wurden zwei Konformere von 1-Oxatrisulfan, *trans*- und *cis*-HSSOH, anhand ihres Rotationsspektrums zum ersten Mal eindeutig identifiziert. Durch detaillierte Analyse der Rotationsspektren wurden spektroskopische Parameter ermittelt, die mit den Ergebnissen neuester, präziser *ab initio* Berechnungen hervorragend übereinstimmen. Die *trans* Konfiguration des 1-Oxatrisulfan stellte sich als leicht stabiler als die *cis* Struktur dieses Moleküls heraus.

Die zweite Molekülart, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurde, ist ¹³C-substituiertes Dimethyl Ether, d.h. die Moleküle ¹³CH₃O¹²CH₃ und (¹³CH₃)₂O. Die Analyse der Rotationsspektren dieser stabilen Moleküle wird erschwert durch Torsionsbewegung der beiden Methylgruppen. Die Entwicklung spektroskopischer Modelle für Moleküle, die solche internen Rotationen aufweisen, ist aktueller Bestandteil der Forschung und erfordert eine enge Zusammenarbeit zwischen theoretischen und experimentellen Untersuchungen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Rotations-Torsions-Spektren beider ¹³C-Isotopologe des Dimethyl Ether im Bereich von Millimeter- bis hin zu sub-mm Wellenlängen aufgenommen. Zur Analyse der Spektren wurde der von P. Groner entwickelte effektive Hamiltonian **ERHAM** verwendet. Damit konnten die Spektren beider Moleküle innerhalb ihrer experimentellen Unsicherheiten angepasst werden. Ein zweites theoretisches Modell, genannt **BELGI-Cs2tops**, das erst kürzlich von I. Kleiner *et al.* entwickelt wurde, wurde zur Analyse des Rotationsspektrums von ¹³CH₃O¹²CH₃ im Vibrationsgrundzustand getestet. Aufgrund der hohen Torsionsbarrieren in Dimethyl Ether sind die spektroskopischen Parameter dieses Modells jedoch stark gekoppelt. Dies verhindert eine erfolgreiche Analyse mit **BELGI**. Das Ergebnis sollte sich erheblich verbessern, wenn torsionsangeregte Zustände der Moleküle in die Analyse mit einbezogen werden.

Darüber hinaus sind Isotopologe von Dimethyl Ether von starkem astronomischen Interesse. Die Identifikation neuer komplexer Moleküle im interstellaren Medium wird behindert durch die große Anzahl von Spektrallinien. Der überwiegende Teil dieser Linien ist jedoch auf häufig auftretende Moleküle wie Dimethyl Ether zurückzuführen, die ein dichtes Spektrum aufweisen und damit die spektralen Signaturen anderer Moleküle überdecken. Daher sind präzise Vorhersagen auch für die Spektren von Isotopologen solcher Moleküle erforderlich, um den Wald der spektralen Linien zu lichten und die Entdeckung neuer Moleküle im interstellaren Medium zu ermöglichen.

²Königshofen *et al.* *Z. Anorg. Allg. Chem.* **625**, 1779–1786 (1999)

Die relativen Isotopenverhältnisse von Molekülen im interstellaren Medium können darüber hinaus Information über den Entstehungsprozess dieser Moleküle liefern. Diese Isotopenverhältnisse sind wichtige Teile im großen Puzzle der astrochemischen Netzwerke, die darauf abzielen, die Entwicklung von Sternentstehungsregionen zu verstehen.

Basierend auf der Analyse mit **ERHAM** konnten im Rahmen dieser Arbeit präzise Vorhersagen für die Frequenzen und Intensitäten der Rotationsübergänge im Vibrationsgrundzustand von $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ und $(^{13}\text{CH}_3)_2\text{O}$ gemacht werden. Diese Daten sind ein wichtiger Beitrag dazu, die Anforderungen durch zukünftige astronomische Beobachtungen mit hochsensiblen Instrumenten wie dem Atacama Large Millimeter Array (ALMA) zu erfüllen. Die Vorhersagen führten bereits jetzt zur ersten interstellaren Entdeckung von $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ in der Sternentstehungsregion G327.3–0.6, deren Spektrum mit dem Atacama Pathfinder Experiment (APEX) aufgenommen wurde.



Zusammenfassung

Die hier vorliegende Arbeit besteht aus zwei Teilen, die sehr unterschiedliche Aspekte der Rotationsspektroskopie und ihrer Anwendung abdecken. Der erste Teil befasst sich mit Oxatrisulfan (HSSOH), das von chemischem Interesse ist. Oxasulfane sind sehr instabil und können daher nicht in reiner Form isoliert werden. Als Folge davon sind die physikalischen und chemischen Eigenschaften dieser Klasse von Molekülen bisher wenig bekannt. Im Laufe der letzten 10 Jahre wurden viele experimentelle und theoretische Studien an HSOH, dem kleinsten Vertreter der Oxasulfane, durchgeführt. Die Bestimmung einer empirischen Struktur dieses Moleküls durch Baum *et al.* in 2006 zeigt, dass HSOH den strukturellen Übergang zwischen seinen verwandten, reinen Molekülen H_2S_2 und H_2O_2 darstellt. Über größere Verbindungen zwischen Wasserstoff, Sauerstoff und Schwefel ist jedoch nur sehr wenig bekannt. Als ihre stabilsten Strukturen werden aufgrund quantenchemischer Rechnungen die schraubenförmige *trans*-Form und die kronenartige *cis*-Form erwartet. Im Fall von H_2O_3 wurde experimentell nur die *trans*-Struktur beobachtet, während die *cis*-Konfiguration trotz intensiver Suche nicht nachgewiesen werden konnte. Für H_2S_3 wurden beide Strukturen experimentell beobachtet, wobei sich die *trans*-Form als energetisch günstiger herausstellte.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde nun die gemischte Verbindung $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}$ untersucht. Erste Hinweise für die Bildung von HSSOH in der Gasphase wurden von Königshofen *et al.* bei der Untersuchung von Infrarotbanden der Pyrolyseprodukte des Moleküls *tert*-Buthylthiosulfinsäure *S-tert*-butylester entdeckt. Ein zweifelsfreier Nachweis von HSSOH und die Unterscheidung verschiedener Konformere dieses Moleküls ist jedoch nur durch die Untersuchung des Rotationsspektrums möglich. Im Rahmen dieser Arbeit wurden daher die Pyrolysebedingungen näher untersucht und damit die Synthese für HSSOH optimiert. Rotationsspektren im Bereich von 75–120 GHz wurden aufgenommen und ausgewertet. Unter einer großen Zahl an Nebenprodukten der Pyrolyse konnten sowohl *trans*- als auch *cis*-HSSOH Moleküle zum ersten Mal eindeutig nachgewiesen werden. Beide Konformere zeigen das Rotationsspektrum von nahezu prolaten, asymmetrischen Kreiseln. Die spektroskopischen Parameter, die durch detaillierte Analyse der Rotationsspektren gewonnen wurden, sind in hervorragender Übereinstimmung mit den Ergebnissen neuester quantenchemischer *ab initio* Rechnungen. Darüber hinaus unterstützen auch die experimentell bestimmten Verhältnisse der Komponenten des elektrischen Dipolmomentes die quantenchemisch vorhergesagten Strukturen beider Konformere. Die aus den *ab initio* Rechnungen folgende leichte energetische Bevorzugung der *trans*-Struktur wird durch die experimentell beobachteten relativen Linienintensitäten beider Konformere ebenfalls bestätigt. Die Bestimmung einer empirischen Struktur für die Konformere von HSSOH stellt jedoch eine experimentelle Herausforderung dar, denn eine Strukturanalyse erfordert die Untersuchung Isotopen-substituierter Versionen des Moleküls. Deren Bildung ist jedoch unrealistisch, wenn die Synthese von HSSOH durch Pyrolyse erfolgt. Daher müssen alternative Synthesemethoden entwickelt werden, um die spektroskopische Untersuchung von Isotopologen von HSSOH zu ermöglichen.

Der zweite Teil dieser Arbeit beinhaltet die Untersuchung des Rotationsspektrums von ^{13}C -substituiertem Dimethyl Ether. Die beiden möglichen Isotope – die einfach und die zweifach ^{13}C -substituierte Form – unterscheiden sich spektroskopisch durch ihre Symmetrie. Beide Isotope sind asymmetrische, fast prolate Kreisel, deren Rota-

tionslinien zusätzliche Aufspaltungen aufgrund von Torsionsbewegungen der beiden Methylgruppen des Moleküls aufweisen. Die unterschiedliche Symmetrie der Isotope spiegelt sich in diesen Torsionsaufspaltungen wider: Im Fall von $(^{13}\text{CH}_3)_2\text{O}$ sind die Methylgruppen identisch und man beobachtet wie beim Hauptisotop die Aufspaltung in vier Torsionskomponenten. $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ beinhaltet zwei nicht-identische Methylgruppen, wodurch die Rotationsniveaus in fünf Torsionskomponenten aufspalten. Die Entwicklung spektroskopischer Modelle zur Beschreibung interner Rotationen in Molekülen ist aktueller Teil der Forschung. In der hier vorliegenden Arbeit wurde das Rotations-Torsions-Spektrum beider ^{13}C -Isotopologe von Dimethyl Ether im Vibrationsgrundzustand über einen großen Frequenzbereich von 34 GHz bis 1.5 THz aufgenommen und untersucht. Unter Verwendung des von P. Groner entwickelten effektiven Hamiltonians **ERHAM** konnten die insgesamt über 7500 zugeordneten Spektrallinien beider Isotopologe innerhalb ihrer experimentellen Unsicherheiten durch ein Modell angepasst werden. Damit ist es möglich, das Spektrum beider Isotopologe und die Intensität ihrer Rotationslinien bis zu einer Frequenz von ungefähr 2 THz präzise vorherzusagen. Für Übergänge zwischen Energieniveaus, deren Rotationsquantenzahlen $J = 60$ und $K_a = 25$ nicht überschreiten, wird erwartet, dass die vorhergesagten Frequenzen eine Unsicherheit von weniger als 1 MHz aufweisen.

Außerdem wurde das erst kürzlich von I. Kleiner *et al.* entwickelte Modell **BELGI-Cs-2tops** getestet, um das Spektrum von $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ zu beschreiben. Im Unterschied zu **ERHAM** beinhaltet dieses Modell explizit Parameter, die das Torsionspotential des Moleküls charakterisieren. Da jedoch die Torsionsbarrieren in Dimethyl Ether sehr groß sind und nur spektroskopische Daten über den Vibrationsgrundzustand des untersuchten Isotops vorliegen, sind die spektroskopischen Parameter des **BELGI** Modells stark gekoppelt. Dadurch war eine genaue Anpassung des Rotationsspektrums von $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ mit **BELGI** nicht möglich. Es ist zu erwarten, dass die Kopplung der Parameter aufgehoben wird, wenn zusätzlich torsionsangeregte Zustände mit in die Analyse einbezogen werden. In diesem Fall würde nicht nur die Beschreibung des Vibrationsgrundzustandes verbessert, sondern es wäre auch eine globale Anpassung aller Rotations- und Vibrationsübergänge möglich, die zusätzlich Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Vibrationszuständen berücksichtigen kann. Eine solche globale Anpassung würde zudem eine genaue Beschreibung des Torsionspotentials ermöglichen.

Darüber hinaus sind die ^{13}C -Isotopologe von Dimethyl Ether von Interesse für die Astronomie. Die Auswertung astronomischer Spektren ist abhängig von präzisen Vorhersagen für Übergangsfrequenzen und -intensitäten, um Moleküle im interstellaren Medium identifizieren zu können. Dafür werden Daten benötigt, die nicht nur einen großen spektralen Bereich umfassen, sondern auch eine Vielzahl unterschiedlicher Moleküle und ihrer Isotopologe. Derzeit wird die Entdeckung neuer Moleküle im interstellaren Medium behindert durch die große Dichte an beobachteten Spektrallinien, die jedoch hauptsächlich auf einige wenige Moleküle zurückzuführen sind. Dimethyl Ether ist eins dieser Moleküle, die als „interstellares Unkraut“ bezeichnet werden, denn mit seinem starken und dichten Rotationsspektrum überdeckt es einen großen Teil des für Astronomen relevanten spektralen Bereiches. Mit der verbesserten Empfindlichkeit neuester Instrumente wie HIFI an Bord des *Herschel*-Satelliten und vor allem dem Interferometer ALMA³ werden auch die weniger häufigen Isotopologe solcher „Unkrautmoleküle“ wesentlich zur spektralen Liniendichte beitragen. Ihre spektroskopische

³Atacama Large Millimeter Array

Charakterisierung ist somit essentiell, um die Entdeckung weiterer komplexer Moleküle im interstellaren Medium zu ermöglichen. Darüber hinaus kann die Untersuchung der $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ -Verhältnisse von komplexen Molekülen einen Einblick in ihren Bildungsprozess im interstellaren Medium ermöglichen. Bei tiefen Temperaturen wird ^{13}C sehr effektiv in CO angereichert, das auf der Oberfläche von interstellarem Staub ausfriert. Komplexe Moleküle, die auf Stauboberflächen direkt aus CO gebildet werden, sollten demnach das gleiche $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ -Verhältnis aufweisen, wie CO. Astrochemische Netzwerke beinhalten eine Vielzahl von Reaktionen, die zur Bildung weiterer komplexer Moleküle führen können. Die Kenntnis der $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ -Verhältnisse der in diesen Netzwerken enthaltenen Moleküle stellt einen wichtigen Baustein zur Überprüfung der vermuteten Reaktionswege dar. Damit wird ein tiefer gehender Einblick in die Entwicklung von Sternentstehungsregionen ermöglicht.

Auf Basis der im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen spektroskopischen Daten für $^{13}\text{CH}_3\text{O}^{12}\text{CH}_3$ und $(^{13}\text{CH}_3)_2\text{O}$ wurde das Rotationsspektrum dieser Moleküle für verschiedene Temperaturen vorhergesagt und für astronomische Untersuchungen zur Verfügung gestellt. Diese Daten leisten einen wichtigen Beitrag zur Auswertung astronomischer Spektren, die mit modernsten, hochempfindlichen Instrumenten aufgenommen werden. Einfach ^{13}C -substituiertes Dimethyl Ether wurde bereits aufgrund dieser Vorhersagen zum ersten Mal interstellar im Spektrum der Sternentstehungsregion G327.3–0.6 entdeckt. Das $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ Isotopenverhältnis für Dimethyl Ether wird derzeit durch S. Bisschop-Jørgensen ausgewertet, um ein besseres Verständnis des interstellaren Bildungsprozesses von Dimethyl Ether zu erlangen.





Contents

Abstract	i
Kurzzusammenfassung	iii
Zusammenfassung	v
Preface	1
I 1-Oxatrisulfane	3
1 Introduction	5
2 Theoretical considerations	7
2.1 Rotational energy	7
2.2 Symmetric top molecules	9
2.2.1 Rigid symmetric rotor	9
2.2.2 Centrifugal distortion	11
2.2.3 Selection rules	11
2.3 Asymmetric top molecules	12
2.3.1 Rigid asymmetric rotor	13
2.3.2 Centrifugal distortion	14
2.3.3 Selection rules	16
2.4 Spectral line intensities	17



3	Synthesis of 1-oxatrisulfane	19
3.1	Pyrolysis pathway	19
3.2	Experimental setup for the flash vacuum pyrolysis	22
3.3	Stability of HSSOH	23
4	Experimental setup	25
5	Rotational spectrum of 1-oxatrisulfane	29
5.1	Identification of rotational lines: Elimination of byproducts	29
5.2	Data analysis	32
5.2.1	Assignment of rotational transitions	32
5.2.2	Relative intensity of <i>b</i> - and <i>c</i> -type transitions	34
5.2.3	Relative abundance of <i>cis</i> - and <i>trans</i> -HSSOH	38
5.3	Molecular parameters	39
6	Conclusion and Discussion	41
II	¹³C-isotopologues of Dimethyl Ether	43
7	Introduction	45
7.1	Astronomical interest	45
7.2	Astrochemical interest	48
7.3	Spectroscopical interest	49
8	Theoretical considerations	51
8.1	Treatment of internal rotation	51
8.1.1	One internal rotor	51
8.1.2	Two internal rotors	55
8.1.3	Hamiltonian for internal and overall rotation	57
8.1.4	Effective rotational Hamiltonian for molecules with two large-amplitude motions	60
8.2	Symmetry considerations	65
8.2.1	Molecular symmetry group	65
8.2.2	Spin statistical weights	68
8.2.3	Selection rules for rotational transitions	71



9	Experimental setup	77
10	Rotational spectra of singly and doubly ^{13}C-substituted dimethyl ether	81
10.1	Experimental details	81
10.1.1	Samples of ^{13}C -substituted dimethyl ether	82
10.2	Assignment of transitions	82
10.3	Analysis with ERHAM	85
10.3.1	Discussion of the spectroscopic parameters	86
10.3.2	Solution of the internal Hamiltonian	89
10.4	Analysis with BELGI_Cs2tops	94
10.4.1	Discussion	97
10.5	Astronomical detection of $^{12}\text{CH}_3\text{O}^{13}\text{CH}_3$	98
10.5.1	Partition function of dimethyl ether for different temperatures	98
10.5.2	Search for $^{12}\text{CH}_3\text{O}^{13}\text{CH}_3$ in Sgr B2(N)	99
10.5.3	Detection of $^{12}\text{CH}_3\text{O}^{13}\text{CH}_3$ in G327.3–0.6	100
11	Results and Prospects	103
III	Appendix	109
A	Line lists of HSSOH	111
B	Useful Tables	121
B.1	Character Tables	121
B.2	Direct Product Tables	123
C	Torsional splitting of energy states and transitions	125
D	Line lists of ^{13}C-dimethyl ether	129
	Bibliography	131