

应用 SFS 与 FTIR 二维相关光谱研究水体中 DOM 组成结构及空间分异特征

李崇蔚^{1,2}, 于会彬^{2*}, 杨芳², 郭旭晶¹, 高红杰², 白杨²

1. 成都信息工程大学资源环境学院, 四川 成都 610225

2. 中国环境科学研究院流域水环境污染综合治理研究中心, 北京 100012

摘要 二维相关光谱(2D-COS)是将动态光谱扩展到两个维度, 包含同谱与异谱, 具有扩展分离重叠峰、判断不同组分变化顺序等特征。2D-COS 异谱将两种不同类型的光谱整合成为一种光谱, 研究不同波段之间的相关性, 辨析组分变化的两种光谱的互补关系。应用同步荧光(SFS)、傅里叶变换红外(FTIR)与 2D-COS 方法, 研究乌梁素海水体中 DOM 组成结构特征, 分析 DOM 组分及官能团之间的协变性, 揭示其空间分异规律。水体中 DOM 由 C=O, C—H, N—H, C—O 等官能团构成, 主要包含类蛋白质(PLF)、微生物类腐殖质(MHLF)、类富里酸(FLF)和类胡敏酸(HLF)等组分, 其中 MHLF 为主要组分。水体中荧光物质、PLF 以及 MHLF 的相对丰度由大到小顺序均为北部>南部>中部。FLF 相对丰度由大到小的顺序是南部>北部>中部, 而 HLF 相对丰度较稳定。SFS 的 2D-COS 分析表明: 北部水体中 PLF 变动较大, 变动顺序为 PLF→MHLF; 中部水体中 MHLF 变动较大, 其与 PLF 变动趋势相反, 变动顺序为 PLF→MHLF; 南部水体中 FLF 变化较大, 变动顺序为 PLF→FLF→MHLF。FTIR 的 2D-COS 分析表明: 北部水体中 C—O 变动较大, 与 C—H, C=O 变动趋势相同, 变化顺序为 C—O→C—H→C=O; 中部水体中 C—O 变动较大, 与 N—H, C=O 变动趋势相同, 变动顺序为 C—O→N—H→C—H→C=O; 南部水体中 C—O 变动较大, 与 N—H, C=O 变动趋势相同, 变动顺序为 C—O→C—H→C=O。SFS 与 FTIR 的 2D-COS 异谱相关分析表明: 北部水体中 PLF 与 C—O 的变化趋势相同, 中部水体中 C—O, N—H, C=O 与 MHLF 变化趋势相同, 而与 PLF 的变化趋势相反, 南部水体中 C—O, C—H, N—H, C=O 与 FLF 变化趋势相同。

关键词 同步荧光; 傅里叶变换红外; 二维相关; 农田退水; 溶解性有机质

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)07-2005-06

引言

溶解性有机质(dissolved organic matter, DOM)是指能通过 0.45 μm 孔径滤膜, 由羟基、醛基、羧基、氨基及羰基等多种活性官能团组成的异质混合物^[1]。DOM 在水生态环境中有着重要作用, 不仅能与金属离子络合进而影响物质的生物有效性, 而且是重金属、多环芳烃、营养盐等物质迁移转化的重要载体^[2]。天然水体中 DOM 主要来源于陆源和内源, 组成结构与地理空间分布及来源密切相关^[3]。研究 DOM 组分结构的时空变化规律, 是揭示 DOM 迁移转化与

演变的关键。

目前, 主要应用紫外-可见、荧光、傅里叶变换红外(Fourier transform infrared, FTIR)、核磁共振等光谱技术^[4], 研究水体中 DOM 组成结构、腐殖化程度及来源转化等。荧光光谱包括与发射/激发光谱、同步荧光光谱(synchronized fluorescence spectra, SFS)和三维光谱, 其中 SFS 可以提供特征峰和肩峰以及更多有关 DOM 组成结构的信息^[5]。FTIR 是一种研究化合物中官能团和极性键振动结构的分析技术, 有取样少、简洁迅速、准确等特点, 可以分析有机物的组成结构及官能团种类^[6]。由于 DOM 是一种复杂的有机混合物, 具有很高的异质性, 其光谱极易出现高度重

收稿日期: 2019-06-25, 修订日期: 2019-10-15

基金项目: 国家水体污染控制与治理科技重大专项(2018ZX07111001), 中国博士后科学基金项目(2013T60148)资助

作者简介: 李崇蔚, 1995 年生, 成都信息工程大学资源环境学院硕士研究生 e-mail: 784364684@qq.com

* 通讯联系人 e-mail: yhybx@163.com

叠谱带,而传统的“识峰”技术只能辨识 DOM 的部分组成结构信息^[7]。二维相关光谱(two-dimensional correlation spectroscopy, 2D-COS)是将外部扰动(如时间、浓度、温度等)产生的动态光谱扩展到两个维度,具有扩展分离重叠峰(提高分辨率)、判断不同组分的变化顺序等特征。此外,应用 2D-COS 异谱相关(将两种不同类型的光谱整合成为一种光谱),研究不同波段之间的相关性,进而可以对扰动引起的结构变化给出互补关系^[8]。因此,2D-COS 被广泛应用到水环境有机质组成结构及迁移转化的研究中。

选取我国最大的农田退水湖泊——乌梁素海作为研究对象,应用 SFS, FTIR 与 2D-COS 方法,分析水体中 DOM 组成结构特征,辨析 DOM 组分及官能团之间的协变性,揭示其空间分异规律。

1 实验部分

1.1 研究区域概况

乌梁素海位于内蒙古自治区巴彦淖尔市境内,北靠阴山,南抵黄河,西接河套灌区,东临乌拉山;位于 40°36'N—41°03'N 和 108°43'E—108°57'E 之间,是我国八大淡水湖之一,是地球同一纬度最大的湿地^[9]。乌梁素海面积 293 km²,容量为 2.5×10⁹~3.0×10⁹ m³,接纳河套灌区 90% 以上的农田排水。所在区域为温带大陆性气候,多年平均气温为 7.3℃,年均降水量为 224 mm,蒸发量为 1 502 mm。近年来巴彦淖尔市工业化、城镇化进程加快,处理与未处理的大量工业废水与城镇生活污水进入湖泊,导致湖泊水质下降,加剧了湖泊富营养化^[10]。

1.2 样品采集

基于乌梁素海的排干分布、湖泊面积、水文条件、航道分布、芦苇等挺水植被分布状况及水流方向(自北向南),在 2018 年 9 月,采集 9 个水样(图 1)。其中,1—3 号点在北部水域,是自然保护区的核心区;4—6 号点在中部水域,是自然保护区的缓冲区;7—9 号点在南部水域,是自然保护区的实验区。使用分层采水器采集水面下 0.5 m 深处的水样,分别装入 500 mL 聚乙烯塑料瓶中,水样采集后马上用 0.45 μm 的醋酸纤维素滤膜进行过滤,滤液中的有机物即为 DOM,带回实验室放置于 0~4℃ 冰箱中保存。

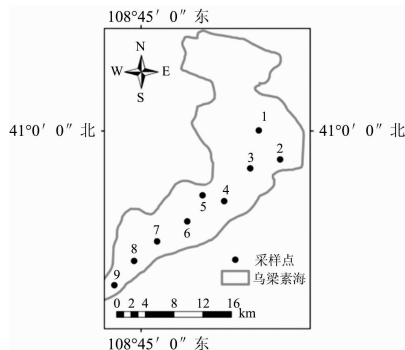


图 1 乌梁素海采样点分布图

Fig. 1 Distribution map of Wuliangsu Lake sampling points

1.3 SFS 和 FTIR 测定

SFS 测定:保持温度恒定[恒温水浴(20±1)℃],以 Milli-Q 超纯水做空白。使用高灵敏度荧光光谱分析仪(Hitachi F-7000, Japan)测定样品 DOM 的同步荧光光谱^[11],测定波长差 Δλ=55 nm,激发波长间隔为 5 nm,扫描范围为 260~550 nm,扫描速度为 240 nm·min⁻¹。此外,从每个荧光区推导出 SFS 面积,它们具有相同的单位(拉曼单位),可以解释同源成分的相对丰度^[12]。

FTIR 测定:对样品先进行冷冻干燥,将所得固体粉末以质量比 1:200 与 KBr(光谱纯)混合均匀,于 50~100 MPa 下压片测红外光谱。采用 Perkin Elmer FTIR(Spectrum 100 NTSS)进行样品测量,波数范围为 4 000~400 cm⁻¹,分辨率 4 cm⁻¹,扫描次数 16 次^[6]。将数据均扣除背景后用 Omnic8.0 软件处理,经过基线校正、平滑处理、归一化在 Origin8.0 软件中对其进行光谱图绘制。

1.4 2D-COS

采用 2D-shige 软件分别对 FTIR 和 SFS 一维光谱进行分析,获取 FTIR 和 SFS 的 2D-COS 图谱,并且将其整合为 2D-COS 异谱相关图谱。

2 结果与讨论

2.1 SFS 分析

在乌梁素海水体中,9 个采样点的 DOM 同步荧光光谱图相似(图 2),有两个明显的尖峰和一个弱肩峰。位于波长 260~300 nm 之间的尖峰为类蛋白荧光(PLF)组分^[13],波长在 300~355 nm 的尖峰被称为微生物类腐殖质荧光(MHLF)组分^[12],位于波长 355~420 nm 间的肩峰则与类富里酸荧光(FLF)组分有关^[14],位于波长 420~500 nm 范围内的肩峰与类胡敏酸荧光(HLF)组分有关^[12]。

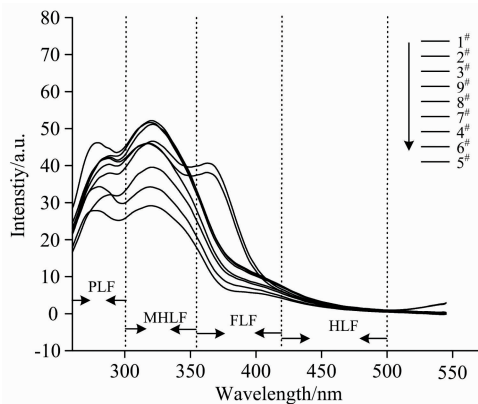


图 2 水体中 DOM 的同步荧光光谱

Fig. 2 Synchronized fluorescence spectra of the DOM components in waters

乌梁素海水体中 DOM 组分的相对丰度如图 3(a)所示。北部水域总相对丰度的平均值为 5 312.56,中部水域为 3 565.69,南部水域为 5 194.73。其中北部水域的平均 PLF 和 MHLF 面积均达到最高分别为 1 561.69±114.09,

2 531.36±23.72, 南部水域次之, 中部水域最小; 南部水域的平均 FLF 面积最高, 为 1 256.89±410.86; 三个水域的 HLF 面积差别不明显。总体而言, 北部水域污染程度高于南部水域, 中部水域的污染程度较轻。这可能是由于北部水域靠近总排干, 接纳了大量的农田退水与生活污水, 导致水域污染加剧; 而南部水域水体流动性差, 有机污染物在此积累, 导致该区域污染程度高于中部水域。

每个荧光组分的量可以用面积的百分比(% PLF, % MHLF, %FLF 和 %HLF)表征[图 3(b)], 在 DOM 中不同

组分的百分含量存在很大的差异。% PLF 变动范围在 24.82%~33.93%之间, %MHLF 的变动范围为 42.44%~48.95%, %FLF 的变动范围为 15.77%~28.23%。%HLF 相对较小(3.63%~4.66%), 变动不大。显然, MHLF 为 DOM 的主要组分, PLF 组分次之。MHLF 主要由植物残体腐烂产生的, 而 PLF 主要存在于生活污水和工业废水中。因此, 乌梁素海水体中的 DOM 的来源具有内源和外源的双重特征。

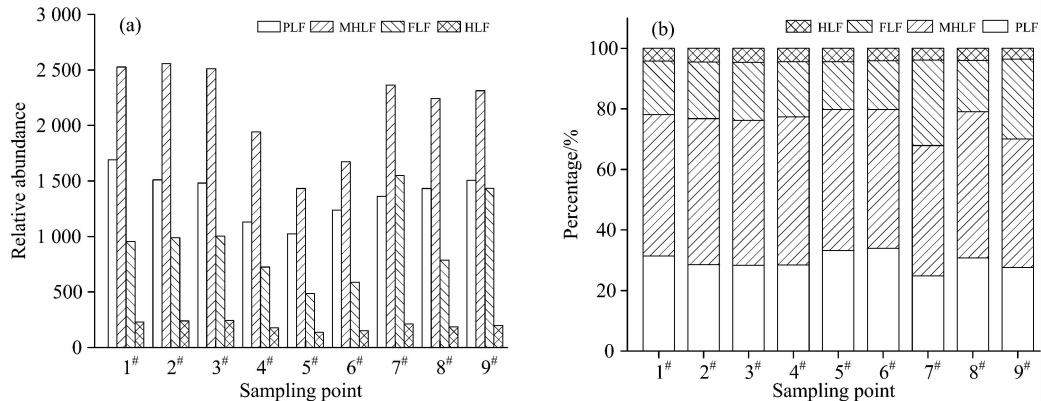


图 3 水体中 DOM 的组分相对丰度及百分比

Fig. 3 Relative abundance and percentage of the DOM components in waters

2.2 2D-SFS-COS 分析

北部水体中 DOM 的 2D-SFS-COS 由图 4(a)和(b)所示, 在谱图(a)中存在 1 个自峰位于 270 nm 处, 表明北部水体的 DOM 中 PLF 变化较大(在外扰因子水体流动的影响下)。在谱图(b)中, 可以看到在(270~310 nm)处有 1 个正交叉峰。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的变化顺序为 270 nm→310 nm, DOM 组分的变动顺序为: PLF→MHLF, 这表明在北部水体流动过程中 PLF 的变化优先于 MHLF。

在谱图(c)中存在 2 个自峰和一个负交叉峰, 自峰位于 274 和 324 nm 处, 且 324 nm 处的荧光强度大于 274 nm 处的荧光强度, 表明在中部水体的 DOM 中 PLF 和 MHLF 受外扰因子水体流动的影响, 且 MHLF 变化较大。交叉峰位于(265~320 nm)处, 表明 PLF 与 MHLF 在中部水体中呈相反的变化趋势。谱图(d)中, 在(275~324 nm)处有 1 个正交叉峰。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的变化顺序为 274→324 nm, 这表明在中部水体流动过程中 DOM 组分的变动顺序为: PLF→MHLF。

中部水体中 DOM 的 2D-SFS-COS 由图 4(c)和(d)所示,

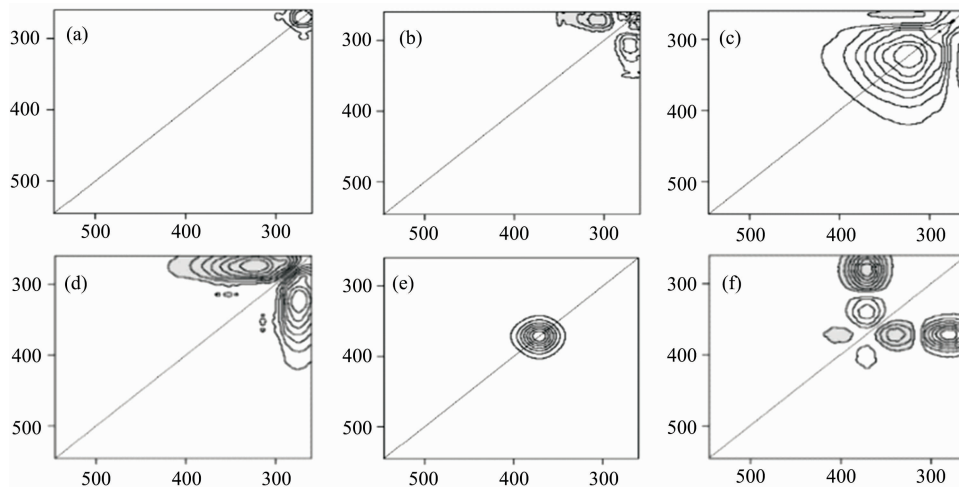


图 4 乌梁素海水体中 DOM 的同步-异步二维同步荧光相关光谱

Fig. 4 Synchronous-asynchronous two-dimensional synchronous fluorescence correlation spectroscopy of DOM in waters of Wuliangsu Lake

南部水体中 DOM 的 2D-SFS-COS 由图 4(e)和(f)所示, 谱图(e)中在 370 nm 处存在一个自峰, 表明在南部水体中 FLF 变化较大。谱图(f)中在(280~370 nm)处有一个正交叉峰, 在(335~370 nm)处有一个负交叉峰。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的变化顺序为 280→370→335 nm, 这表明在南部水体流动过程中 DOM 组分的变动顺序为: PLF→FLF→MHLF。

2.3 FTIR 分析

DOM 红外光谱的透射峰位于 1 142, 1 415, 1 455, 1 541 及 1 640 cm^{-1} 附近(图 5), 其中在 1 640 cm^{-1} 附近出现的峰为苯环、烯炔类 C=C 和醛、酮中的 C=O 伸缩振动及分子间振动, 表明可能含有较多的芳香族不饱和物质; 在 1 541 cm^{-1} 附近出现的峰为酰胺 II 带 C=O 及仲酰胺 N-H 振动峰; 在 1 455 cm^{-1} 附近出现的峰为脂肪族 CH₃ 和 CH₂ 中 C-H 的振动, 羧基上的不对称伸缩振动或 C-OH 的变形振动, 表明含有较多的脂肪类化合物; 在 1 415 cm^{-1} 附近出现的峰为 DOM 中 N-H 的弯曲振动, 表明样品中可能存在蛋白类物质; 在 1 142 cm^{-1} 附近出现的峰为多糖类物质 C-O 的伸缩振动峰^[8]。由此来判断乌梁素海水体 DOM 主要含有的官能团为 C=O, C-H, N-H, C-O。

2.4 2D-COS-FTIR 分析

由于 FTIR 的 2 000~800 cm^{-1} 可以表征酰胺、羧酸、酯和碳水化合物, 选择该区域做 2D-COS-FTIR(图 6)。在北部水域的同步光谱中[图 6(a)], 主要检测到 1 个自峰和 3 个交叉峰, 与一维 FTIR 出峰位置基本一致。自峰位于 1 150 cm^{-1} 处, 为 C-O 官能团, 表明在乌梁素海北部区域的水体中 C-O 官能团变化较大。此外, 在 1 150~1 440, 1 150~

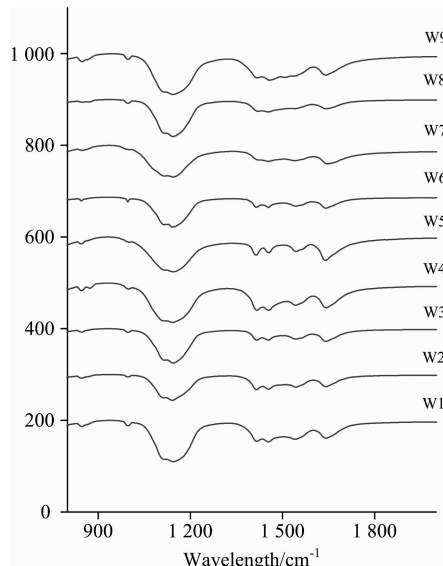


图 5 乌梁素海水体中 DOM 的红外光谱

Fig. 5 FTIR spectra of DOM in waters of Wuliangsu Lake

1 540 和 1 150~1 650 cm^{-1} 处出现 3 个交叉峰, 说明 1 150 与 1 440, 1 540 和 1 650 cm^{-1} 波段之间呈正相关。以上表明在北部区域的水体中, DOM 中的官能团 C-O 与 C-H, C=O 的变动趋势相同。在北部水域的异步光谱中[图 6(b)], 1 150~1 420, 1 150~1 450 和 1 150~1 640 cm^{-1} 出现 3 个正交叉峰。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的趋势为: 1 150 > 1 450 > 1 640 cm^{-1} 。表明在北部区域的水体中 DOM 官能团变化顺序为 C-O→C-H→C=O。

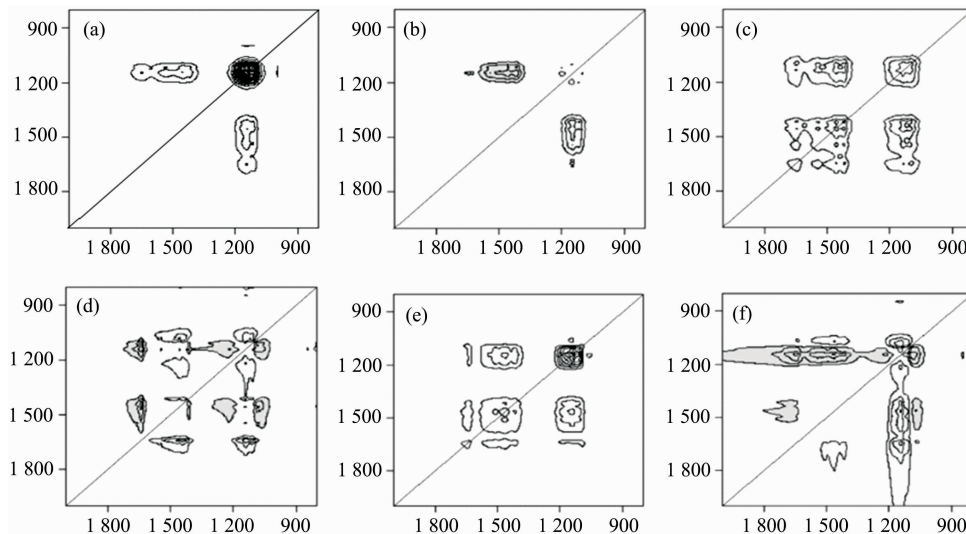


图 6 乌梁素海水体中 DOM 的同步-异步二维红外相关光谱

Fig. 6 Synchronous-asynchronous two-dimensional infrared correlation spectrum of DOM in waters of Wuliangsu Lake

在中部水域的同步光谱中[图 6(c)], 主要检测到 4 个自峰和 3 个交叉峰。自峰分别位于 1 140, 1 410, 1 460 和 1 650 cm^{-1} , 为 C-O, N-H, C-H, C=O 官能团。其中,

1 150 cm^{-1} 的自峰强度最大, 表明在中部水域的 C-O 官能团的变化较大。此外, 在 1 150~1 420, 1 150~1 650 和 1 450~1 650 cm^{-1} 处出现了 3 个交叉峰, 这些波段之间呈正

相关。以上表明在中部水域中, DOM 的官能团 C—O 与 N—H, C=O, C—H 和 C=O 变动趋势相同。在中部水域的异步光谱中[图 6(d)], 出现了 3 个正交叉峰(1 140~1 220, 1 140~1 640 和 1 440~1 640 cm^{-1}) 和 4 个负交叉峰(1 080~1 140, 1 080~1 440, 1 220~1 440 和 1 410~1 440 cm^{-1})。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的趋势为: 1 140>1 410>1 440>1 640 cm^{-1} , 表明在中部水域的水体中 DOM 官能团的变化顺序为 C—O→N—H→C—H→C=O。

南部水域的同步光谱与中部水域的相似[图 6(e)], 表明 C—O 官能团的变化较大, 且官能团 C—O 与 N—H, C=O, C—H 和 C=O 变动趋势相同。在异步光谱中[图 6(f)], 出现了 4 个正交叉峰(1 140~1 220, 1 140~1 460, 1 140~1 640 和 1 460~1 640 cm^{-1}) 和 2 个负的交叉峰(1 080~1 140 和 1 080~1 460 cm^{-1})。根据 Noda 法则^[15], 吸收峰的趋势为: 1 140>1 460>1 640 cm^{-1} , 表明在南部水域的水体中 DOM 官能团的变化顺序为 C—O→C—H→C=O。

2.5 SFS 和 FTIR 的 2D-COS 异谱相关分析

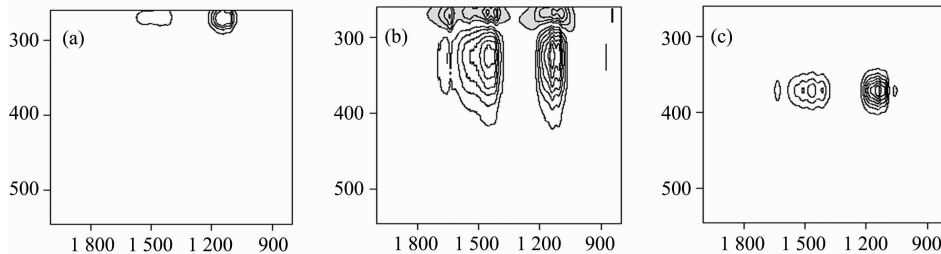


图 7 水体中 DOM 的 SFS 和 FTIR 的 2D-COS 异谱相关图

Fig. 7 Synchronous maps obtained via 2D heterospectral correlation analysis of the synchronous fluorescence spectroscopy and FTIR of DOM in waters

3 结 论

(1) 乌梁素海水体中 DOM 由类蛋白质、微生物类腐殖质、类富里酸和类胡敏酸组成, 以微生物类腐殖质为主, 荧光物质相对丰度为北部>南部>中部。

(2) 北部和中部水体中主要的变动组分为类蛋白质和微生物类腐殖质, 类蛋白质变动较大且最先变动; 南部水体中主要的变动组分为类蛋白质、微生物类腐殖质和类富里酸, 其中类富里酸变化较大, 变动顺序为类蛋白质→类富里酸→

应用 2D-COS 异谱相关, 分析三个水域 SFS 和 FTIR 的协变性特征(图 7)。在北部水域[图 7(a)], 1 540, 1 450 和 1 150 cm^{-1} 处的 FTIR 波段与 270 nm 处的 SFS 波段呈正相关, 1 140 cm^{-1} 处的 FTIR 波段与 270 nm 处的同步荧光波段相关性显著, 表明 PLF 组分与 C—O 官能团有相同的变化趋势。

在中部水域[图 7(b)], 1 640, 1 410 和 1 140 cm^{-1} 处的 FTIR 波段与 270 nm 处的 SFS 波段呈负相关, 与 324 nm 处的波段呈正相关, 表明在中部水域中, 随着水体流动 C—O, N—H, C=O 官能团与 PLF 组分有相反的变化趋势, 与 MHLF 组分的变化趋势相同。

在南部水域[图 7(c)], 1 640, 1 510, 1 460, 1 410 和 1 150 cm^{-1} 处的 FTIR 波段与 370 nm 处的 SFS 波段呈正相关, 其中 1 140 cm^{-1} 处的波段与 270 nm 处的波段峰强度最高, 表明 C—O, C—H, N—H, C=O 官能团与 FLF 组分有相同的变化趋势, 其中 C—O 官能团与 FLF 组分的协变性最好。

微生物类腐殖质。

(3) 湖区主要的变动官能团为 C—O, N—H, C—H 和 C=O, 其中 C—O 官能团变动最大, 各官能团之间的变动趋势相同, 不同水域中官能团的变化顺序为 C—O→C—H→C=O。

(4) 北部水体中类蛋白质与 C—O 的变化趋势相同; 中部水体中 C—O, N—H, C=O 与微生物类腐殖质变化趋势相同, 而与类蛋白质的变化趋势相反; 南部水体中 C—O, C—H, N—H, C=O 与类富里酸变化趋势相同。

References

- [1] Nkansah K, Adedipe O, Dawson-Andoh B, et al. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2015, 147: 157.
- [2] Xu P, Zhu J, Fu Q, et al. *Journal of Soils & Sediments*, 2018, (7): 1.
- [3] Goldman J H, Rounds S A, Needoba J A. *Environmental Science & Technology*, 2012, 46(8): 4374.
- [4] Landry C, Tremblay L. *Environmental Science & Technology*, 2012, 46(3): 1700.
- [5] Guo X J, Yuan D H, Jiang J Y, et al. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2013, 104: 280.
- [6] YU Min-da, HE Xiao-song, TAN Wen-bing, et al (虞敏达, 何小松, 檀文炳, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis (光谱学与光谱分析)*, 2017, 37(8): 149.
- [7] Nuzahat H, Wei C. *Science of The Total Environment*, 2018, 643: 479.

- [8] Yu G H, Tang Z, Xu Y C, et al. *Environmental Science & Technology*, 2011, 45(21): 9224.
- [9] Fang Y, Changyou L, Lepparanta M, et al. *Water Science & Technology*, 2016, 74(12): 2773.
- [10] Fang Y, Changyou L, Xiaohong S, et al. *Journal of Lake Sciences*, 2016, 28(2): 455.
- [11] GUO Xu-jing, XI Bei-dou, XIE Sen, et al(郭旭晶, 席北斗, 谢 森, 等). *Chinese Journal of Environmental Engineering(环境工程学报)*, 2012, 6(2): 440.
- [12] Yu H, Song Y, Tu X, et al. *Bioresource Technology*, 2013, 144(Complete): 595.
- [13] Hur J, Jung K Y, Jung Y M. *Water Research*, 2011, 45(9): 2974.
- [14] Yu H, Xi B, Ma W, et al. *Soil Science Society of America Journal*, 2011, 75(4): 1385.
- [15] Procter I N, Chester W, Ozaki Y, et al. *Science in China(Series B)*, 2004, 47(3): 257.

Applying SFS, FTIR and 2D-COS to Analyze Structural Compositions of DOM in Aquatic System, and Reveal Their Special Variation

LI Chong-wei^{1, 2}, YU Hui-bin^{2*}, YANG Fang², GUO Xu-jing¹, GAO Hong-jie², BAI Yang²

1. College of Resources and Environment, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China

2. Watershed Research Center for Comprehensive Treatment of Water Environmental Pollution, Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012, China

Abstract Two-dimensional correlation spectroscopy (2D-COS) can extend the dynamic spectrum to two dimensions, which contains synchronous and asynchronous maps. It not only can separate overlapping peaks to enhance resolution, but also discriminate variation orders of different components. 2D-COS heterospectrum can combine two different spectra into one spectrum, which is applied to trace the relationship between different bands, and identify complementarity of component variations. Synchrotron fluorescence spectroscopy (SFS), Fourier transform infrared (FTIR) and two-dimensional correlation spectroscopy (2D-COS) were applied to analyze the structural composition of dissolved organic matter (DOM) in Wuliangsu Lake, trace the covariance between DOM components and functional groups, and reveal their spatial variations. According to the FTIR spectroscopy, DOM was mainly composed of C=O, C—H, N—H, C—O functional groups. DOM contained protein-like (PLF), microbial humic-like (MHLF), fulvic-like (FLF) and humic-like (HLF) components by the SFS, among which the MHLF was the dominated component. The decreasing order of the contents of fluorescent materials, PLF and MHLF abundance was north>south>central. The decreasing of the relative FLF abundance was south>north>central, but the relative abundance of HLF kept stable. According to the SFS 2D-COS, the PLF variation was larger than the MHLF in the northern region, whose order was PLF→MHLF; the MHLF showed the negative correlation with the PLF in the central region, whose variation order was PLF→MHLF; the FLF variation was larger than the PLF and MHLF in the southern region, whose order was PLF→FLF→MHLF. According to the FTIR 2D-COS, the C—O was positively correlated to the C—H and C=O in the northern region, whose variation order was C—O→C—H→C=O; the C—O exhibited the positive correlation with the N—H and C=O in the central region, whose variation order was C—O→N—H→C—H→C=O; the C—O was the positive relationship with the N—H and C=O in the southern region, whose variation order was C—O→C—H→C=O. According to the 2D-COS between SFS and FTIR, the C—O showed the positive correlation with the PLF in the northern region; the C—O, N—H and C=O had the positive correlations with the MHLF in the central region, but had the negative correlations with the PLF; the C—O, C—H, N—H and C=O exhibited the positive relationship with the FLF. In summary, SFS and FTIR combined with 2D-COS can be used as an effective method to analyze the covariance of DOM components and functional groups in water and reveal their spatial variation.

Keywords SFS; FTIR; Two-dimensional correlation; Farmland drainage; DOM

(Received Jun. 25, 2019; accepted Oct. 15, 2019)

* Corresponding author