

Supplement of Biogeosciences, 17, 331–344, 2020
<https://doi.org/10.5194/bg-17-331-2020-supplement>
© Author(s) 2020. This work is distributed under
the Creative Commons Attribution 4.0 License.



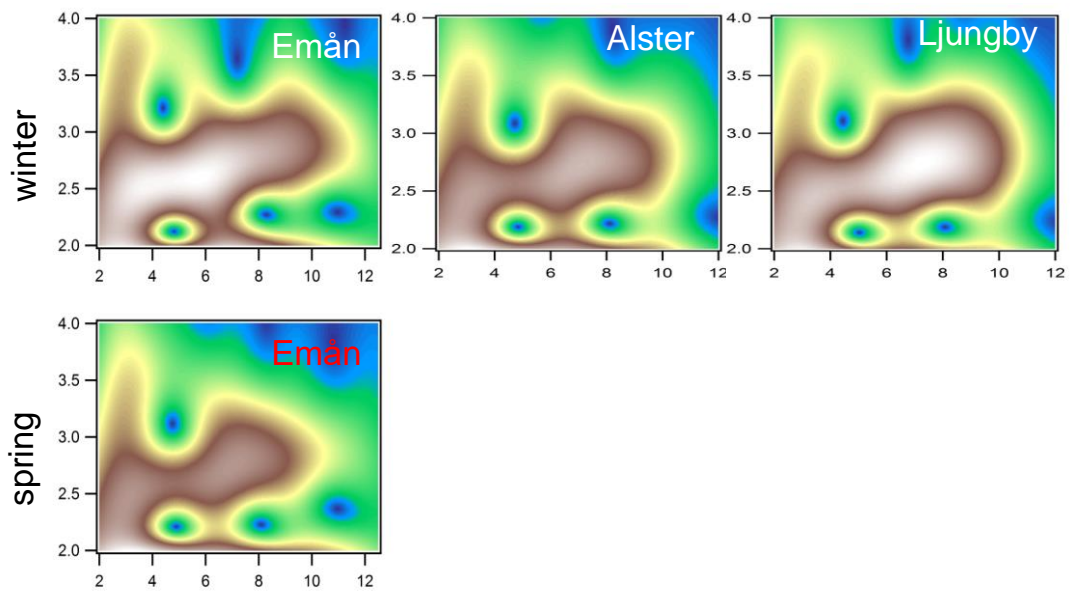
Supplement of

Organic iron complexes enhance iron transport capacity along estuarine salinity gradients of Baltic estuaries

Simon David Herzog et al.

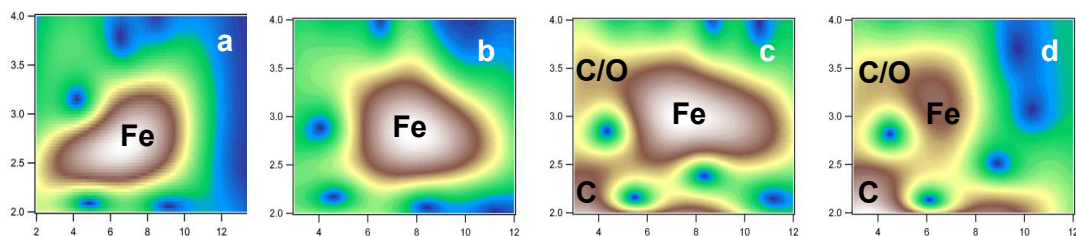
Correspondence to: Simon David Herzog (simon.herzog@biol.lu.se)

The copyright of individual parts of the supplement might differ from the CC BY 4.0 License.

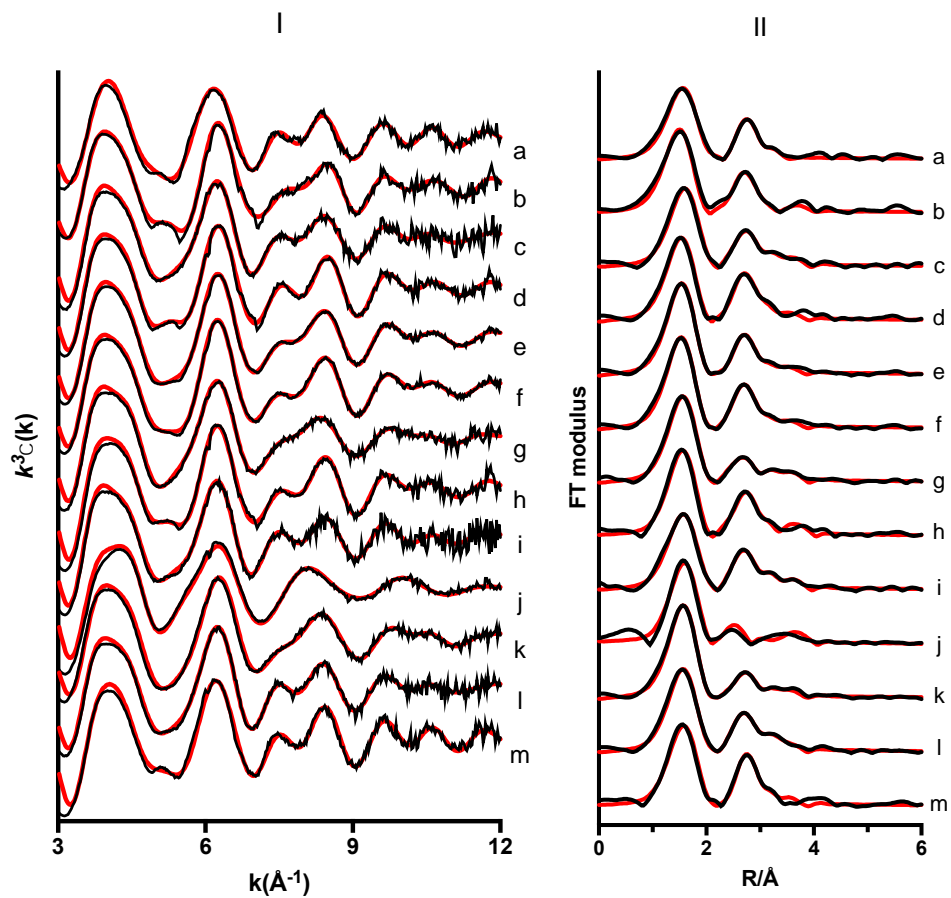


15 **Figure S1:** High resolution WT modulus ($\eta=4$, $\sigma=2$) of EXAFS data river Emån, Alster and Ljungby (white=autumn, red spring). The samples are plotted as a function of k (\AA^{-1}) on the x-axis and R (\AA) on the y-axis.

For the quantitative modeling of the EXAFS spectra two input structures were used, goethite for the Fe-Fe paths and trisoxalatoiron(III) for the Fe-O, Fe-C and Fe-C/O. WT plots for the model compounds (Figure S2), show that the different paths in the model compounds are in good agreement with the ones found in our samples (Figure 2). The Fe (oxy)hydroxides ferrihydrite and goethite (Figure S2 a and b) are represented in the same area of the WT plots, so that distinction between the two is difficult.



25 **Figure S2:** Figure S2. Morlet wavelet transforms for a ($\eta = 10$, $\sigma = 1$) and for b-c ($\eta = 8$, $\sigma = 1$) of EXAFS data displaying the second and third coordination shells collected on model compounds: (a) 6-line ferrihydrite by Sundman et al. (2014), (b) goethite, (c) goethite/trisoxalatoiron(III) mixture (50:50), and (d) goethite/trisoxalatoiron(III) mixture (25:75) by Karlsson and Persson (2010).



30

Figure S3: k^3 -weighted EXAFS spectra (I) and Fourier transformations (II) of all samples (black line) and corresponding model fits (red line): a= Öre river; b= Emån autumn; c= Emån spring; d= Alster; e= Ljungby; f= Lyckeby autumn; g= Lyckeby spring; h= Mörrum autumn; i= Mörrum spring; j= Svineö; k= Biveröd; l= Helge spring and m= Örekil.

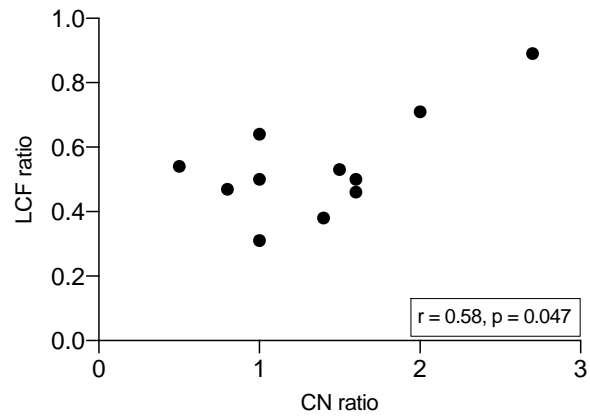
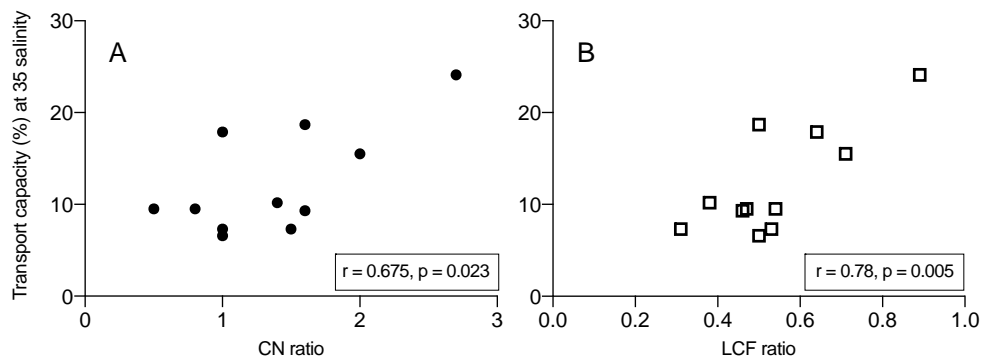


Figure S4 Relationship between the LCF-ratio and CN-ratio.



40 Figure S5 Relationship between Fe transport capacity at 35 salinity and relative contribution of organically complexed Fe as assessed by the CN-ratio (A) and LCF-ratio (B).

Table S1: k^3 -weighted Fe K-edge EXAFS fit results for all samples

Site	Fe-O (SS)			Fe-Fe (SS)		Fe-Fe (SS)		Fe-C (SS)		Fe-C/O (MS) ^a		ΔE^0 %	Ratio Fe-C/Fe-Fe ^b
	CN	R(Å)	σ^2	CN	R(Å)	CN	R(Å)	CN	R(Å)	CN	R(Å)		
R. Öre	6.0	2.03	0.0150	1.7	3.11	0.8	3.43	0.9	2.91	1.8	3.95	3.7	0.5
R. Emån	6.1	1.98	0.0129	1.9	3.06	0.7	3.41	2.6	2.87	5.2	4.30	0.4	1.4
	6.0	2.03	0.0143	1.5	3.12	0.5	3.45	2.5	2.98	5.1	4.23	6.3	1.6
R. Alster	5.9	2.00	0.0132	2.2	3.07	0.7	3.41	2.2	2.89	4.5	4.22	3.7	1.0
R. Ljungby	6.0	2.01	0.0123	1.9	3.08	0.4	3.41	1.9	2.90	3.8	4.19	3.7	1.0
R. Lyckeby	6.0	2.00	0.0121	2.1	3.08	0.5	3.42	2.0	2.92	4.1	4.20	2.9	1.0
	6.0	2.03	0.0131	1.0	3.12	0.4	3.46	2.8	2.99	5.6	4.23	5.8	2.7
R. Mörrum	5.7	2.02	0.0128	2.4	3.12	0.8	3.40	3.5	2.96	7.0	4.31	7.2	1.5
	6.5	2.04	0.0159	1.5	3.13	0.6	3.45	3.0	3.02	6.0	4.26	7.1	2.0
Svineö	5.4	2.05	0.0132	-	-	-	-	3.1	3.00	6.3	4.32	10	-
Biveröd	6.0	2.01	0.0118	1.2	3.09	0.3	3.44	2.0	2.94	4.0	4.18	3.1	1.7
R. Helge	6.1	2.03	0.0136	1.4	3.11	0.7	3.48	2.3	3.02	4.6	4.21	5.9	1.6
R. Örekil	5.9	2.04	0.0140	2.7	3.13	0.8	3.40	2.2	2.93	4.3	4.21	7.1	0.8

Abbreviations were used for coordination number (CN), bond distance (R) and Debye-Waller factor (σ^2). ^aFe-C/O is correlated to as CN (Fe-C) x 2. Also the Debye-Waller factor of Fe-C/O was correlated to as σ^2 (Fe-C) x 2. The σ^2 for both Fe-Fe was 0.01, adapted from Maillot, et al. (2011) and for Fe-C it was 0.0075 from Sundman, et al. (2014). S_0^2 was set to 0.85. ^bRatio between the CN of the first Fe-C path and the Fe-Fe path. Confidence limits on the obtained R and CN estimated by a procedure recommended by the International XAFS Society Standards and Criteria Committee (Sayers 2000) performed by (Sundman, et al. 2013) CN Fe-O: ± 0.6 ; CN Fe-C: ± 0.7 ; CN Fe-Fe: ± 0.6 ; R Fe-O: ± 0.01 ; R Fe-C: ± 0.07 ; and R Fe-Fe: ± 0.06 .

Table S2: EXAFS LCF results for the river mouth samples.

Site	Fe-OM	Fe-oxides			LCF ratio	Chi-Sq.
	F(III) bound to					
	Suwannee river				(Fe-OM/	
	fulvic acids	Ferrihydrite	Lepidocrocite	Sum	Fe-oxides)	
River Öre	0.26	0.38	0.1	0.48	0.54	32.3
River Emån	0.24	0.54	0.08	0.62	0.38	22.2
	0.28	0.5	0.06	0.56	0.50	35.4
River Alster	0.22	0.62	0.08	0.7	0.31	17.0
River Ljungby	0.34	0.43	0.1	0.53	0.64	9.9
River Lyckeby	0.3	0.49	0.11	0.6	0.50	9.0
	0.39	0.39	0.05	0.44	0.89	24.9
River Mörrum	0.3	0.46	0.11	0.57	0.53	41.5
	0.47	0.52	0.14	0.66	0.71	20.7
Biverö	0.42	0.36	0.06	0.42	1.00	9.6
Svineö	0.58	-	-	-	-	88.3
River Helge	-	-	-	-	-	-
	0.27	0.52	0.07	0.59	0.46	24.2
River Örekil	0.27	0.43	0.13	0.56	0.47	62.4

55 Table S3. Metadata for Fig 3 a)

Energy (keV)	Helge river mouth	Energy (keV)	Biverö	Energy (keV)	Svineö	Energy (keV)	Fe(II)-acetylacetonate	Energy (keV)	six-line Ferrihydrate
7,100029	0,055664	7,100027	0,039900	7,100029	0,025200	7,100033	0,010136	7,100019	0,000022
7,100030	0,055014	7,100029	0,039900	7,100030	0,024900	7,100031	0,010157	7,100020	0,000057
7,100030	0,055014	7,100028	0,040000	7,100029	0,025200	7,100030	0,010169	7,100019	0,000041
7,100029	0,055664	7,100024	0,040200	7,100027	0,025000	7,100032	0,010529	7,100016	0,000051
7,100032	0,052895	7,100023	0,039800	7,100027	0,025000	7,100036	0,010168	7,100013	0,000027
7,100031	0,057063	7,100025	0,040000	7,100029	0,025200	7,100039	0,010549	7,100011	0,000038
7,100029	0,055664	7,100027	0,039900	7,100030	0,024900	7,100039	0,010549	7,100011	0,000052
7,100030	0,055014	7,100029	0,039900	7,100030	0,024900	7,100038	0,010718	7,100012	0,000038
7,100030	0,055014	7,100028	0,040000	7,100029	0,025200	7,100035	0,010269	7,100013	0,000030
7,100029	0,055664	7,100024	0,040200	7,100027	0,025000	7,100033	0,010136	7,100017	0,000033
7,100030	0,055014	7,100023	0,039800	7,100027	0,025000	7,100031	0,010157	7,100020	0,000040
7,100030	0,055014	7,100024	0,040200	7,100029	0,025200	7,100032	0,010529	7,100020	0,000046
7,100029	0,055664	7,100027	0,039900	7,100030	0,024900	7,100035	0,010269	7,100019	0,000035
7,100032	0,052895	7,100028	0,040000	7,100030	0,024900	7,100038	0,010718	7,100016	0,000043
7,100032	0,052895	7,100028	0,040000	7,100029	0,025200	7,100039	0,010549	7,100012	0,000074
7,100045	0,060363	7,100027	0,039900	7,100028	0,025200	7,100039	0,010549	7,100008	0,000049
7,100082	0,052473	7,100024	0,040200	7,100030	0,024900	7,100038	0,010718	7,100009	0,000028
7,100138	0,052292	7,100024	0,040200	7,100032	0,025000	7,100033	0,010136	7,100013	0,000062
7,100205	0,057099	7,100025	0,040000	7,100031	0,025000	7,100030	0,010169	7,100015	0,000052
7,100285	0,056614	7,100027	0,039900	7,100028	0,025200	7,100030	0,010169	7,100017	0,000052
7,100370	0,057216	7,100029	0,039900	7,100028	0,025200	7,100032	0,010529	7,100020	0,000046
7,100461	0,053625	7,100029	0,039900	7,100029	0,025200	7,100033	0,010136	7,100019	0,000052
7,100561	0,054546	7,100025	0,040000	7,100030	0,024900	7,100035	0,010269	7,100016	0,000043
7,100664	0,059130	7,100027	0,039900	7,100030	0,024900	7,100038	0,010718	7,100013	0,000033
7,100761	0,057603	7,100028	0,040000	7,100028	0,025200	7,100039	0,010549	7,100011	0,000042
7,100848	0,054778	7,100028	0,040000	7,100035	0,025000	7,100038	0,010718	7,100009	0,000044
7,100928	0,060626	7,100027	0,039900	7,100075	0,025000	7,100036	0,010531	7,100011	0,000039
7,101011	0,055862	7,100024	0,040200	7,100141	0,024900	7,100035	0,010269	7,100012	0,000030
7,101099	0,055790	7,100023	0,039800	7,100218	0,025000	7,100032	0,010529	7,100015	0,000046
7,101198	0,055166	7,100038	0,040000	7,100296	0,025200	7,100030	0,010169	7,100019	0,000041
7,101301	0,054866	7,100078	0,040000	7,100378	0,024900	7,100032	0,010529	7,100020	0,000041
7,101398	0,053165	7,100142	0,039900	7,100462	0,025100	7,100033	0,010136	7,100017	0,000038
7,101494	0,055449	7,100220	0,040100	7,100552	0,025200	7,100036	0,010168	7,100015	0,000052
7,101594	0,053330	7,100299	0,039900	7,100645	0,024900	7,100039	0,010549	7,100012	0,000036

7,101695	0,054880	7,100377	0,040100	7,100739	0,025100	7,100040	0,010460	7,100009	0,000043
7,101794	0,053741	7,100458	0,040000	7,100832	0,025300	7,100038	0,010718	7,100009	0,000049
7,101891	0,055538	7,100546	0,040100	7,100924	0,025000	7,100035	0,010269	7,100012	0,000053
7,101984	0,058821	7,100641	0,039900	7,101017	0,025000	7,100033	0,010136	7,100015	0,000032
7,102080	0,054874	7,100740	0,039900	7,101112	0,025000	7,100030	0,010169	7,100017	0,000069
7,102184	0,054423	7,100836	0,039900	7,101211	0,024900	7,100030	0,010169	7,100020	0,000046
7,102295	0,053784	7,100927	0,040000	7,101304	0,024900	7,100032	0,010529	7,100020	0,000044
7,102402	0,056250	7,101019	0,039900	7,101391	0,025100	7,100033	0,010136	7,100017	0,000035
7,102500	0,055734	7,101117	0,040200	7,101480	0,024900	7,100036	0,010168	7,100015	0,000038
7,102594	0,056148	7,101213	0,039900	7,101573	0,025000	7,100039	0,010549	7,100012	0,000066
7,102690	0,053238	7,101304	0,039900	7,101675	0,024900	7,100047	0,010702	7,100009	0,000054
7,102787	0,053977	7,101391	0,040100	7,101783	0,024900	7,100072	0,010185	7,100011	0,000061
7,102885	0,053149	7,101475	0,039800	7,101888	0,025000	7,100116	0,010421	7,100029	0,000041
7,102977	0,057411	7,101570	0,039900	7,101988	0,025000	7,100183	0,010215	7,100071	0,000041
7,103075	0,053730	7,101675	0,040100	7,102091	0,025100	7,100262	0,010824	7,100133	0,000039
7,103183	0,059904	7,101782	0,039900	7,102197	0,024900	7,100352	0,010699	7,100209	0,000030
7,103298	0,055225	7,101891	0,040000	7,102298	0,024900	7,100452	0,010204	7,100287	0,000041
7,103416	0,063926	7,101994	0,040100	7,102394	0,025300	7,100552	0,010453	7,100366	0,000065
7,103528	0,059037	7,102092	0,040000	7,102484	0,025000	7,100657	0,010298	7,100449	0,000033
7,103627	0,057106	7,102191	0,040100	7,102576	0,025100	7,100759	0,010335	7,100537	0,000049
7,103720	0,053355	7,102294	0,040000	7,102676	0,025000	7,100848	0,010466	7,100632	0,000033
7,103819	0,058211	7,102391	0,040000	7,102782	0,025100	7,100931	0,010177	7,100729	0,000041
7,103922	0,053249	7,102481	0,039900	7,102890	0,025000	7,101017	0,010196	7,100825	0,000046
7,104021	0,058710	7,102576	0,040000	7,102990	0,025100	7,101106	0,010427	7,100919	0,000027
7,104123	0,056034	7,102679	0,040100	7,103089	0,025100	7,101202	0,010655	7,101012	0,000043
7,104226	0,056606	7,102786	0,039900	7,103192	0,025200	7,101302	0,010202	7,101110	0,000040
7,104329	0,054244	7,102891	0,039900	7,103296	0,024900	7,101399	0,010587	7,101205	0,000049
7,104438	0,058086	7,102993	0,040000	7,103403	0,025200	7,101495	0,010520	7,101294	0,000046
7,104548	0,059417	7,103092	0,040100	7,103506	0,025100	7,101598	0,010428	7,101382	0,000033
7,104647	0,054475	7,103190	0,040000	7,103606	0,025000	7,101702	0,010429	7,101470	0,000046
7,104739	0,053904	7,103295	0,040200	7,103709	0,025200	7,101801	0,010329	7,101563	0,000038
7,104836	0,052863	7,103403	0,040000	7,103816	0,025200	7,101896	0,010161	7,101668	0,000038
7,104936	0,054605	7,103506	0,040200	7,103929	0,025000	7,101989	0,010791	7,101777	0,000051
7,105040	0,059688	7,103609	0,040100	7,104036	0,025100	7,102084	0,010640	7,101882	0,000052
7,105147	0,060951	7,103712	0,040200	7,104134	0,025000	7,102191	0,010552	7,101981	0,000040
7,105247	0,054250	7,103819	0,039900	7,104226	0,025100	7,102302	0,010268	7,102080	0,000046
7,105344	0,057085	7,103930	0,040200	7,104322	0,025100	7,102405	0,010214	7,102181	0,000057

7,105443	0,057244	7,104036	0,040200	7,104425	0,024800	7,102502	0,010404	7,102284	0,000032
7,105542	0,055225	7,104132	0,040000	7,104528	0,024900	7,102600	0,010575	7,102382	0,000038
7,105636	0,056357	7,104223	0,040000	7,104628	0,025100	7,102699	0,010394	7,102471	0,000051
7,105723	0,058695	7,104318	0,040200	7,104727	0,025000	7,102797	0,010653	7,102567	0,000049
7,105809	0,056108	7,104421	0,040100	7,104833	0,024900	7,102893	0,010293	7,102668	0,000040
7,105900	0,058399	7,104528	0,039900	7,104945	0,025300	7,102988	0,010211	7,102774	0,000035
7,106005	0,061484	7,104632	0,040100	7,105055	0,025000	7,103083	0,010266	7,102881	0,000057
7,106111	0,057186	7,104735	0,040100	7,105154	0,025000	7,103188	0,010394	7,102981	0,000030
7,106214	0,057536	7,104841	0,040000	7,105245	0,025000	7,103305	0,010265	7,103079	0,000046
7,106317	0,060061	7,104948	0,040100	7,105334	0,025000	7,103419	0,010211	7,103179	0,000062
7,106420	0,058354	7,105054	0,040300	7,105426	0,025100	7,103529	0,010547	7,103283	0,000038
7,106523	0,056030	7,105150	0,040100	7,105523	0,025100	7,103631	0,010368	7,103391	0,000043
7,106623	0,056749	7,105241	0,040100	7,105622	0,025100	7,103727	0,010557	7,103496	0,000035
7,106718	0,055420	7,105331	0,040200	7,105717	0,025100	7,103828	0,010686	7,103596	0,000038
7,106808	0,058154	7,105424	0,040200	7,105814	0,025200	7,103930	0,010204	7,103699	0,000027
7,106895	0,060767	7,105523	0,040100	7,105914	0,025100	7,104028	0,011032	7,103808	0,000033
7,106993	0,060011	7,105625	0,040000	7,106017	0,024800	7,104123	0,011129	7,103918	0,000056
7,107098	0,059018	7,105722	0,039800	7,106117	0,025100	7,104223	0,010077	7,104024	0,000022
7,107203	0,060398	7,105817	0,040100	7,106212	0,025300	7,104330	0,010396	7,104120	0,000048
7,107308	0,059876	7,105916	0,040100	7,106304	0,025200	7,104441	0,010453	7,104211	0,000059
7,107407	0,058878	7,106018	0,039900	7,106400	0,025100	7,104552	0,010586	7,104309	0,000054
7,107505	0,062026	7,106114	0,039900	7,106504	0,025200	7,104653	0,010202	7,104410	0,000038
7,107606	0,059568	7,106209	0,040100	7,106612	0,025000	7,104745	0,010679	7,104518	0,000054
7,107710	0,059160	7,106303	0,040200	7,106718	0,025000	7,104841	0,010176	7,104623	0,000027
7,107810	0,058557	7,106401	0,040100	7,106815	0,025200	7,104942	0,010655	7,104723	0,000043
7,107906	0,062240	7,106508	0,040300	7,106908	0,025300	7,105045	0,010703	7,104829	0,000046
7,108007	0,052673	7,106615	0,040300	7,107003	0,025200	7,105148	0,010426	7,104938	0,000069
7,108110	0,059245	7,106719	0,040000	7,107098	0,025200	7,105247	0,010684	7,105043	0,000030
7,108217	0,058124	7,106818	0,040300	7,107196	0,025000	7,105345	0,010547	7,105141	0,000045
7,108324	0,057080	7,106911	0,040100	7,107291	0,025100	7,105446	0,010834	7,105230	0,000062
7,108422	0,055448	7,107000	0,040300	7,107386	0,025300	7,105547	0,010425	7,105321	0,000062
7,108510	0,059239	7,107094	0,040000	7,107488	0,025200	7,105643	0,010392	7,105413	0,000048
7,108600	0,057695	7,107190	0,040100	7,107596	0,025100	7,105730	0,010484	7,105513	0,000051
7,108698	0,058474	7,107283	0,040000	7,107711	0,025000	7,105816	0,010458	7,105616	0,000059
7,108797	0,058601	7,107381	0,040300	7,107820	0,025100	7,105908	0,010205	7,105712	0,000048
7,108897	0,056330	7,107486	0,040300	7,107920	0,025000	7,106008	0,010364	7,105807	0,000043
7,109000	0,060185	7,107596	0,040300	7,108015	0,025000	7,106113	0,010427	7,105906	0,000051

7,109103	0,056254	7,107710	0,040300	7,108109	0,025200	7,106217	0,010835	7,106006	0,000062
7,109211	0,055989	7,107818	0,040100	7,108208	0,025200	7,106319	0,010438	7,106104	0,000059
7,109318	0,061820	7,107917	0,040100	7,108304	0,025200	7,106422	0,010362	7,106200	0,000043
7,109417	0,059022	7,108011	0,040200	7,108397	0,025200	7,106528	0,010716	7,106294	0,000069
7,109507	0,057680	7,108106	0,040100	7,108493	0,025100	7,106632	0,010332	7,106390	0,000048
7,109593	0,057634	7,108205	0,040000	7,108593	0,025200	7,106729	0,010625	7,106496	0,000046
7,109683	0,060417	7,108303	0,040200	7,108700	0,025200	7,106817	0,010191	7,106603	0,000051
7,109777	0,060297	7,108400	0,040000	7,108806	0,025300	7,106903	0,010599	7,106708	0,000070
7,109875	0,057924	7,108497	0,040100	7,108907	0,025100	7,106995	0,010408	7,106806	0,000083
7,109974	0,058917	7,108596	0,040500	7,108999	0,025200	7,107098	0,010134	7,106900	0,000048
7,110072	0,056856	7,108702	0,040100	7,109093	0,025300	7,107203	0,010682	7,106991	0,000067
7,110171	0,059705	7,108808	0,040200	7,109193	0,025100	7,107308	0,010174	7,107086	0,000061
7,110274	0,062072	7,108907	0,040100	7,109292	0,025200	7,107410	0,010512	7,107185	0,000068
7,110376	0,060085	7,108999	0,040100	7,109391	0,025200	7,107511	0,010615	7,107279	0,000072
7,110473	0,058479	7,109092	0,040300	7,109488	0,025500	7,107612	0,010707	7,107374	0,000064
7,110563	0,057697	7,109188	0,040000	7,109583	0,025400	7,107717	0,010298	7,107478	0,000070
7,110656	0,057442	7,109291	0,040200	7,109682	0,025200	7,107818	0,010683	7,107586	0,000067
7,110758	0,059974	7,109395	0,040200	7,109783	0,025100	7,107910	0,010264	7,107699	0,000081
7,110864	0,062398	7,109492	0,040100	7,109880	0,025300	7,108007	0,010144	7,107809	0,000072
7,110970	0,059784	7,109586	0,040200	7,109972	0,025500	7,108111	0,010199	7,107908	0,000080
7,111070	0,060911	7,109684	0,040400	7,110059	0,025400	7,108217	0,010170	7,108002	0,000053
7,111165	0,058522	7,109784	0,040300	7,110149	0,025600	7,108323	0,010702	7,108098	0,000059
7,111260	0,064665	7,109879	0,040200	7,110249	0,025600	7,108420	0,010326	7,108198	0,000105
7,111357	0,063655	7,109969	0,040400	7,110354	0,025500	7,108513	0,010511	7,108296	0,000069
7,111453	0,067268	7,110059	0,040400	7,110457	0,025700	7,108605	0,010270	7,108393	0,000081
7,111546	0,063083	7,110146	0,040500	7,110559	0,026000	7,108702	0,010958	7,108490	0,000085
7,111635	0,060084	7,110246	0,040500	7,110660	0,026400	7,108801	0,010244	7,108588	0,000088
7,111732	0,066795	7,110354	0,040600	7,110764	0,026800	7,108900	0,010613	7,108694	0,000056
7,111838	0,062918	7,110459	0,041000	7,110867	0,026700	7,109002	0,010450	7,108802	0,000069
7,111949	0,062392	7,110561	0,040800	7,110964	0,027500	7,109103	0,010240	7,108900	0,000077
7,112063	0,065771	7,110660	0,041100	7,111055	0,027600	7,109209	0,010555	7,108991	0,000080
7,112170	0,069345	7,110759	0,041500	7,111142	0,028500	7,109318	0,010553	7,109085	0,000100
7,112268	0,075955	7,110861	0,042000	7,111236	0,029300	7,109420	0,010332	7,109182	0,000099
7,112365	0,074050	7,110961	0,042200	7,111337	0,030100	7,109513	0,010333	7,109281	0,000101
7,112464	0,077953	7,111055	0,042500	7,111440	0,031400	7,109602	0,010528	7,109384	0,000111
7,112565	0,079647	7,111144	0,043100	7,111543	0,032400	7,109690	0,010896	7,109484	0,000104
7,112665	0,079606	7,111238	0,043600	7,111641	0,034400	7,109782	0,010293	7,109579	0,000129

7,112762	0,081757	7,111340	0,044600	7,111737	0,035200	7,109880	0,010521	7,109678	0,000138
7,112862	0,088973	7,111444	0,045400	7,111836	0,036800	7,109978	0,010651	7,109778	0,000102
7,112966	0,094442	7,111546	0,046700	7,111941	0,038800	7,110073	0,010840	7,109872	0,000130
7,113075	0,089694	7,111642	0,048800	7,112044	0,040000	7,110171	0,010816	7,109960	0,000162
7,113182	0,095905	7,111737	0,049300	7,112142	0,043000	7,110275	0,010858	7,110049	0,000211
7,113281	0,102106	7,111835	0,050400	7,112241	0,044200	7,110380	0,010972	7,110140	0,000172
7,113377	0,102040	7,111937	0,051500	7,112346	0,047600	7,110477	0,010879	7,110239	0,000190
7,113476	0,104024	7,112042	0,052900	7,112457	0,051100	7,110570	0,010990	7,110349	0,000219
7,113577	0,111550	7,112145	0,055800	7,112567	0,056700	7,110661	0,010906	7,110455	0,000233
7,113680	0,112717	7,112247	0,057200	7,112670	0,058900	7,110758	0,011498	7,110556	0,000273
7,113782	0,109068	7,112351	0,059000	7,112764	0,061800	7,110864	0,011246	7,110655	0,000289
7,113878	0,113196	7,112461	0,062500	7,112855	0,066600	7,110972	0,011137	7,110755	0,000363
7,113979	0,121605	7,112568	0,064500	7,112952	0,069300	7,111072	0,010945	7,110854	0,000455
7,114082	0,119198	7,112668	0,069000	7,113052	0,074300	7,111169	0,012744	7,110951	0,000492
7,114185	0,123816	7,112760	0,071800	7,113157	0,081100	7,111266	0,012663	7,111044	0,000591
7,114279	0,121243	7,112851	0,073600	7,113260	0,084600	7,111362	0,013914	7,111135	0,000581
7,114365	0,128386	7,112948	0,079400	7,113362	0,091400	7,111457	0,013277	7,111229	0,000896
7,114455	0,121779	7,113049	0,083200	7,113471	0,089200	7,111549	0,014490	7,111333	0,001062
7,114550	0,124287	7,113157	0,086900	7,113582	0,098200	7,111639	0,015301	7,111437	0,001349
7,114657	0,122376	7,113261	0,090800	7,113688	0,094800	7,111734	0,017191	7,111537	0,001821
7,114769	0,132191	7,113363	0,095300	7,113784	0,092800	7,111840	0,018292	7,111632	0,002031
7,114873	0,114802	7,113471	0,099400	7,113874	0,094700	7,111953	0,019135	7,111731	0,002791
7,114978	0,121813	7,113578	0,101000	7,113965	0,090100	7,112066	0,021313	7,111831	0,003461
7,115086	0,120643	7,113680	0,104000	7,114061	0,089600	7,112172	0,023361	7,111933	0,004764
7,115190	0,113608	7,113775	0,104000	7,114162	0,093000	7,112272	0,027511	7,112036	0,005522
7,115292	0,106879	7,113865	0,106000	7,114264	0,091400	7,112370	0,029196	7,112135	0,007079
7,115389	0,109416	7,113957	0,108000	7,114361	0,095100	7,112469	0,032210	7,112235	0,008929
7,115479	0,104310	7,114057	0,107000	7,114460	0,093500	7,112570	0,038217	7,112339	0,010252
7,115568	0,101166	7,114160	0,110000	7,114564	0,094500	7,112666	0,038550	7,112449	0,012969
7,115667	0,096026	7,114262	0,109000	7,114668	0,090700	7,112762	0,045874	7,112559	0,014639
7,115776	0,095238	7,114360	0,110000	7,114769	0,093300	7,112859	0,050575	7,112660	0,019195
7,115884	0,094558	7,114459	0,110000	7,114865	0,093900	7,112964	0,062022	7,112752	0,021833
7,115988	0,094290	7,114561	0,110000	7,114963	0,090600	7,113076	0,062930	7,112844	0,024352
7,116093	0,090740	7,114662	0,111000	7,115063	0,091200	7,113186	0,067195	7,112941	0,029632
7,116195	0,086833	7,114762	0,111000	7,115170	0,086500	7,113287	0,075520	7,113043	0,031660
7,116299	0,082047	7,114861	0,108000	7,115281	0,087200	7,113382	0,068824	7,113148	0,037517
7,116403	0,091556	7,114957	0,106000	7,115386	0,084700	7,113481	0,076241	7,113252	0,041332

7,116501	0,086756	7,115059	0,104000	7,115484	0,078500	7,113583	0,083752	7,113356	0,045114
7,116598	0,090240	7,115169	0,102000	7,115580	0,075400	7,113684	0,076609	7,113462	0,049896
7,116701	0,078483	7,115280	0,094100	7,115676	0,066600	7,113784	0,093411	7,113571	0,049298
7,116810	0,082316	7,115386	0,090000	7,115774	0,066300	7,113882	0,081468	7,113676	0,056249
7,116919	0,082758	7,115481	0,086700	7,115871	0,059800	7,113980	0,081850	7,113771	0,057254
7,117027	0,084854	7,115575	0,081000	7,115969	0,056300	7,114085	0,082743	7,113858	0,059627
7,117128	0,086675	7,115670	0,077900	7,116068	0,054600	7,114190	0,074412	7,113949	0,063917
7,117222	0,092198	7,115767	0,076800	7,116174	0,050400	7,114285	0,084340	7,114046	0,063724
7,117317	0,090844	7,115866	0,070800	7,116288	0,049100	7,114373	0,079878	7,114151	0,067458
7,117418	0,082159	7,115963	0,070100	7,116403	0,048400	7,114463	0,080480	7,114255	0,067580
7,117516	0,083479	7,116063	0,067100	7,116509	0,047300	7,114557	0,081316	7,114352	0,069859
		7,116172	0,064700	7,116609	0,046900	7,114659	0,079877	7,114447	0,067632
		7,116288	0,064400	7,116706	0,045600	7,114769	0,084550	7,114548	0,066600
		7,116403	0,064300	7,116807	0,046800	7,114876	0,075301	7,114652	0,065030
		7,116507	0,063200	7,116909	0,046700	7,114981	0,078270	7,114754	0,061979
		7,116606	0,063600	7,117005	0,047000	7,115088	0,072410	7,114852	0,061639
		7,116701	0,064000	7,117102	0,047800	7,115197	0,074188	7,114947	0,056625
		7,116799	0,063400	7,117204	0,047800	7,115299	0,068965	7,115047	0,055513
		7,116899	0,063600	7,117311	0,049600	7,115393	0,067365	7,115155	0,051461
		7,117000	0,063400	7,117422	0,050300	7,115484	0,058073	7,115267	0,045617
		7,117100	0,064900	7,117531	0,051100	7,115574	0,052104	7,115371	0,042926
		7,117202	0,065100	7,117630	0,052600	7,115672	0,057475	7,115468	0,039001
		7,117309	0,064800	7,117721	0,054500	7,115779	0,049520	7,115563	0,037239
						7,115884	0,046820	7,115658	0,035568
						7,115989	0,044193	7,115755	0,032576
						7,116096	0,038266	7,115856	0,032136
						7,116200	0,037268	7,115951	0,030303
						7,116303	0,034934	7,116050	0,030663
						7,116410	0,031462	7,116160	0,029568
						7,116509	0,032787	7,116273	0,027351
						7,116602	0,034002	7,116389	0,027483
						7,116705	0,030468	7,116498	0,026237
						7,116815	0,031454	7,116595	0,026836
						7,116924	0,030606	7,116691	0,025653
						7,117030	0,035911	7,116790	0,026377
						7,117129	0,033143	7,116893	0,025865
						7,117225	0,032062	7,116992	0,025363

						7,117320	0,034995	7,117090	0,026333
						7,117420	0,031282	7,117191	0,024742
						7,117521	0,033059	7,117295	0,025545
								7,117406	0,024691
								7,117513	0,024803

Table S4. Metadata for Figure 3 b)

Energy (keV)	Helge river mouth	Biverö	Svineö	Fe(II)-acetylacetonate	six-line Ferrihydrate
7,132	2,63478	1,725728	1,050601	0,570997	0
7,1316	2,841715	1,736329	1,037364	0,566204	0,004804
7,1312	3,04865	1,74693	1,024127	0,56141	0,009609
7,1308	3,255585	1,75753	1,010889	0,556617	0,014414
7,1304	3,350016	1,742822	1,024996	0,551735	0,020537
7,13	3,444446	1,728114	1,039104	0,546852	0,026661
7,1296	3,328694	1,743856	1,033073	0,544495	0,03274
7,1292	3,212942	1,759597	1,027042	0,542138	0,038819
7,1288	3,097189	1,775339	1,021011	0,539781	0,040814
7,1284	2,857134	1,792737	1,042132	0,547651	0,043974
7,128	2,617079	1,810135	1,063252	0,555522	0,047134
7,1276	2,783321	1,80646	1,055084	0,551427	0,045676
7,1272	2,949563	1,802785	1,046915	0,546728	0,044218
7,1268	3,115805	1,79911	1,038746	0,53879	0,042759
7,1264	3,339135	1,797121	1,05243	0,52649	0,04761
7,126	3,562464	1,795131	1,066113	0,51419	0,052461
7,1256	3,42233	1,778339	1,076146	0,510439	0,051853
7,1252	3,282196	1,761547	1,086178	0,506688	0,051246
7,1248	3,142061	1,744755	1,095837	0,502938	0,050639
7,1244	3,191326	1,766026	1,099893	0,503141	0,055528
7,124	3,240591	1,787296	1,103949	0,503344	0,056701
7,1236	3,24701	1,791408	1,104412	0,502229	0,051305
7,1232	3,253428	1,795519	1,104874	0,501115	0,045909
7,1228	3,259848	1,799631	1,105337	0,5	0,040514
7,1224	2,982482	1,823346	1,118575	0,50646	0,04626
7,122	2,705117	1,847061	1,131812	0,512921	0,052007
7,1216	2,881972	1,84596	1,138762	0,520258	0,059191
7,1212	3,067505	1,84486	1,145711	0,527595	0,066374
7,1208	3,064109	1,847704	1,145024	0,530716	0,068008
7,1204	3,060712	1,850548	1,144338	0,533836	0,071168
7,12	3,057316	1,853392	1,143651	0,536957	0,07853
7,1196	2,934197	1,811823	1,136208	0,555346	0,085519
7,1192	3,267613	1,815132	1,144971	0,557553	0,092837

7,1188	3,324064	1,827763	1,160932	0,57301	0,090958
7,1184	3,336184	1,841961	1,163296	0,581782	0,096974
7,118	3,551692	1,841279	1,166569	0,586176	0,097234
7,1176	3,403022	1,838892	1,192601	0,603235	0,09936
7,1172	3,43306	1,850923	1,197625	0,614268	0,095459
7,1168	3,187757	1,819302	1,203095	0,614198	0,092842
7,1164	3,408193	1,825528	1,181545	0,616854	0,094251
7,116	3,345425	1,851339	1,25965	0,630948	0,097509
7,1156	3,193815	1,866467	1,220321	0,658363	0,098319
7,1152	3,447022	1,886617	1,252435	0,665103	0,107689
7,1148	3,320737	1,887627	1,232416	0,681176	0,114473
7,1144	2,821612	1,918325	1,282621	0,720501	0,133341
7,114	3,236934	1,96105	1,350359	0,777895	0,189124
7,1136	2,955928	2,061542	1,426841	0,852715	0,264381
7,1132	3,314105	2,118823	1,514107	0,928513	0,356941
7,1128	3,391153	2,240718	1,589006	1,068344	0,469128
7,1124	3,5116	2,386829	1,727707	1,208686	0,605288
7,112	3,893476	2,493451	1,793087	1,355113	0,761792
7,1116	3,884471	2,670877	1,943506	1,509564	0,925443
7,1112	4,04576	2,835454	2,077462	1,6754	1,064706
7,1108	4,146541	2,933123	2,219722	1,793544	1,191383
7,1104	4,340255	3,051095	2,36455	1,958123	1,312413
7,11	3,754807	3,184522	2,456471	2,060788	1,390627
7,1096	4,00831	3,40056	2,629692	2,231969	1,555148
7,1092	4,464325	3,4651	2,778133	2,285558	1,700458
7,1088	4,080363	3,558026	2,783922	2,350402	1,819214
7,1084	4,5	3,678015	2,781439	2,367528	1,922665
7,108	4,49182	3,634494	2,787698	2,368231	1,992869
7,1076	4,259979	3,7	2,785033	2,397463	2
7,1072	4,170201	3,601505	2,762358	2,374041	1,965132
7,1068	4,083363	3,55046	2,799059	2,394237	1,914485
7,1064	4,142563	3,500665	2,866337	2,377644	1,828472
7,106	4,218137	3,422321	2,877884	2,433422	1,741207
7,1056	4,081598	3,369898	2,940069	2,490835	1,641416
7,1052	3,91018	3,365286	2,999114	2,5	1,534648
7,1048	3,975795	3,305705	3	2,489908	1,439681
7,1044	4,097814	3,330256	2,996076	2,494881	1,354971

7,104	3,798967	3,24548	2,933087	2,394852	1,261268
7,1036	3,670611	3,179868	2,860962	2,390744	1,188523
7,1032	3,726244	3,089821	2,773629	2,271304	1,117509
7,1028	3,526314	3,025437	2,696235	2,169065	1,047847
7,1024	3,749731	2,916581	2,590444	2,073242	0,985059
7,102	3,64852	2,849432	2,504118	2,006322	0,935869
7,1016	4,000403	2,779936	2,547207	1,901857	0,87319
7,1012	3,65301	2,604268	2,45902	1,789741	0,798198
7,1008	3,663045	2,563262	2,335418	1,698642	0,725593
7,1004	3,463876	2,509039	2,273719	1,619579	0,681572
7,1	3,335837	2,472552	2,286222	1,548024	0,625099
7,0996	3,424346	2,42524	2,101346	1,477994	0,56716
7,0992	3,03478	2,315939	2,005109	1,388867	0,508532
7,0988	3,156067	2,267041	1,978116	1,33309	0,457423
7,0984	3,282795	2,164	1,810774	1,221722	0,390489
7,098	3,431854	2,130892	1,72053	1,14407	0,347483
7,0976	3,344613	2,051226	1,680694	1,126339	0,309889
7,0972	3,224815	2,033301	1,708442	1,037477	0,280004
7,0968	3,002752	2,002529	1,576279	0,962487	0,234892
7,0964	3,050313	1,957688	1,471997	0,924378	0,208711
7,096	3,113242	1,923405	1,412804	0,867737	0,192978
7,0956	3,281404	1,920258	1,31416	0,832642	0,168398
7,0952	3,45132	1,890709	1,32782	0,769769	0,154319
7,0948	3,30157	1,864392	1,271411	0,762405	0,166777
7,0944	3,140642	1,852002	1,274671	0,725828	0,176708
7,094	3,474119	1,833462	1,26513	0,700578	0,187341
7,0936	3,559789	1,833075	1,217175	0,689869	0,211536
7,0932	3,467854	1,807058	1,20035	0,676117	0,217776
7,0928	3,248969	1,836525	1,196815	0,649806	0,238529
7,0924	3,167636	1,862968	1,232893	0,654836	0,252909
7,092	3,302611	1,840683	1,176478	0,668941	0,269931
7,0916	3,21621	1,838215	1,214453	0,645721	0,274228
7,0912	3,349289	1,834858	1,195525	0,642414	0,262097
7,0908	3,178865	1,83262	1,142682	0,650438	0,246033
7,0904	3,214134	1,824096	1,195055	0,615489	0,217412
7,09	3,456493	1,771774	1,225491	0,620069	0,19795
7,0896	3,531664	1,806425	1,209822	0,606365	0,179523

7,0892	3,634179	1,768142	1,167172	0,622381	0,157066
7,0888	2,900355	1,770044	1,097678	0,604538	0,132547
7,0884	3,021373	1,763822	1,079023	0,592619	0,114689
7,088	3,591824	1,74236	1,137932	0,615011	0,10773
7,0876	3,103015	1,76217	1,088355	0,579522	0,10329
7,0872	2,848481	1,75061	1,099081	0,604855	0,100673
7,0868	3,165702	1,767562	1,11071	0,580232	0,082651
7,0864	2,991434	1,774718	1,126157	0,564376	0,082925
7,086	2,723112	1,772464	1,055637	0,585035	0,082238
7,0856	2,982166	1,761269	1,046356	0,571246	0,072891
7,0852	3,00382	1,791016	1,031154	0,593286	0,091009
7,0848	2,961423	1,773432	1,051026	0,591711	0,07934
7,0844	2,993488	1,760169	1	0,580204	0,07446
7,084	2,757281	1,790784	1,031115	0,589024	0,074758
7,0836	3,09818	1,784332	1,031211	0,599459	0,073607
7,0832	2,924288	1,804322	1,108895	0,616127	0,078116
7,0828	3,200525	1,94754	1,099099	0,605141	0,065951
7,0824	3,062741	1,960599	1,067346	0,62436	0,073731
7,082	3,192229	1,936136	1,083266	0,640177	0,101765

Table S5. Metaddata for Figure 5.

Helge autumn		Helge spring	
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)
0	1,22	0	2,28
0,5	0,681566667	1,9	0,957
2,6	0,396666667	4	0,748
4,6	0,221783333	7	0,541
7,4	0,094266667	10	0,443
10,3	0,04865	14,9	0,298
15	0,026483333	24,7	0,205
24,8	0,015516667	34,2	0,182
34,6	0,0091		
Svineö		Biveröd	
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)
0	7,011	0	4,777
0	6,251	0	3,584
2	5,563833333	2	2,727666667
4,2	5,012	4,2	2,262166667
7,5	4,047166667	7,5	1,82
10,7	2,9085	10,7	1,47
15,8	1,867833333	15,8	1,166666667
25,8	1,148583333	25,9	0,79135
35,8	0,866716667	36,1	0,5873
Örekil		Öre	
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)
0	0,22	0	1,365
0,8	0,12	0,4	0,541
1,8	0,118	0,9	0,529
3,8	0,093	2	0,484
5,7	0,059	3,2	0,417
7,6	0,048	4,1	0,39867
9,4	0,036	5,1	0,337
14,1	0,027	6,1	0,287
18,4	0,025	7,3	0,255
22,9	0,022	8,2	0,243

27,7	0,026		9,2	0,233
36,1	0,018		10,2	0,209
			15,2	0,165
			20,2	0,136
			25,2	0,117
			35,2	0,111
Mörrum autumn		Mörrum spring		
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)	
0	0,449	0	0,745	
1,9	0,138	1,9	0,416	
4	0,129	4,2	0,33	
6,9	0,093	7,1	0,254	
9,9	0,066	10	0,208	
14,9	0,061	15	0,13	
24,6	0,033	25,3	0,106	
34,1	0,028	35,1	0,099	
Emån autumn		Emån spring		
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)	
0	0,595	1,9	0,522	
2	0,315	4	0,43	
7,2	0,184	7	0,367	
10,3		10	0,295	
15,3		15	0,244	
25,4	0,076	24,1	0,183	
35,6	0,060629145	34,2	0,138	
Lyckeby autumn		Lyckeby spring		
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)	
0	2,095	1,9	1,273	
1,9	1,151	4	1,011	
4	0,859	7	0,846	
7	0,597	10	0,72	
10,1	0,38	15	0,612	
14,9	0,237	24,2	0,496	
24,4	0,144	34,2	0,43	

34,2	0,118		
Ljunby		Alster	
Salinity	tFe (mg/L)	Salinity	tFe (mg/L)
0	1,76	0	0,402
1,9	0,967	2	0,161
4,1	0,699	4,2	0,141
7,1	0,498	7,3	0,093
10,1	0,379	10,4	0,05
15,2	0,294	15,5	0,04
25,9	0,287	25,9	0,035
35	0,27	35,9	0,025

Metadata Figure 6

Öreskil			
Salinity	in situ	salinity	theoretical Fe
	tFe (mg/L)		tFe (mg/L)
0	0,22	0	0,2203
0,9	0,19	0,8	0,116501587
1,9	0,134	1,8	0,11105
4,7	0,088	3,8	0,082463492
9,6	0,047	5,7	0,050708333
14,3	0,036	7,6	0,040228571
18,9	0,028	9,4	0,031028571
25,2	0,022	14,1	0,024334524
		18,4	0,022890476
		22,9	0,021981746
		25	0,022030159
		36,1	0,023773413
Öre			
Salinity	in situ	salinity	theoretical
	tFe (mg/L)		tFe (mg/L)
0	1,365	0	1,365
0,02	1,257	0,4	0,510571788
0,31	1,141	0,9	0,463334257
0,67	0,878	2	0,360326196
1,2	0,759	3,2	0,273446348
1,47	0,723		
3,01	0,259		
3,97	0,309		
3,83	0,323		
3,77	0,239		