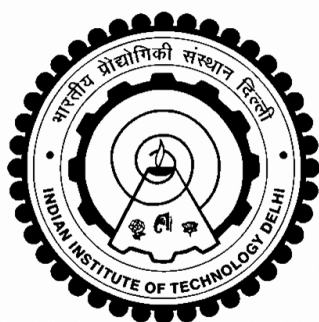


**EXPLORING THE USE OF RICE STRAW DERIVED BIOCHAR AS AN
ANODE MATERIAL FOR LITHIUM-ION BATTERY AND AN
ADSORBENT FOR WASTEWATER TREATMENT**

DRISHTI BHATIA



**DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING
INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI
JULY 2024**

©Indian Institute of Technology Delhi (IITD), New Delhi, 2024

**EXPLORING THE USE OF RICE STRAW DERIVED BIOCHAR AS AN
ANODE MATERIAL FOR LITHIUM-ION BATTERY AND AN
ADSORBENT FOR WASTEWATER TREATMENT**

by

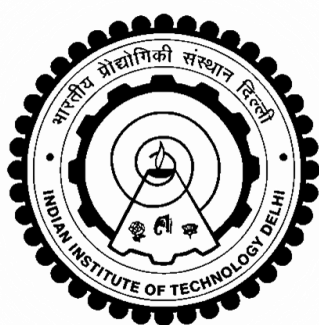
DRISHTI BHATIA

DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING

*Submitted
in fulfilment of the requirements of the degree of*

DOCTOR OF PHILOSOPHY

to the



INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI

JULY 2024

CERTIFICATE

This is to certify that the thesis entitled, “**Exploring the use of rice straw derived biochar as an anode material for lithium-ion battery and an adsorbent for wastewater treatment**” being submitted by **Ms. Drishti Bhatia** to the Indian Institute of Technology Delhi for the award of **Doctor of Philosophy** is a record of bonafide research work carried out by her under my guidance and supervision in conformity with the rules and regulations of Indian Institute of Technology Delhi.

The research report and results presented in this thesis have not been submitted, in part or full, to any other university or institute for the award of any degree or diploma.

Date:

Prof. Anil K. Saroha

Place:

Professor

Department of Chemical Engineering

Indian Institute of Technology Delhi

New Delhi-110016

ACKNOWLEDGEMENTS

Words are often less to express one's gratitude. This thesis was completed with the support and encouragement of numerous people. I would like to take this opportunity to express my gratitude to all those who helped me throughout this research.

First and foremost, I would like to express my sincere gratitude to my supervisor, Prof. Anil K. Saroha, for providing necessary infrastructure and resources to carry out this research. This research would not have been possible without his guidance and support.

I am extremely grateful to my SRC members, Prof. Vivek V. Buwa (Department of Chemical Engineering), Prof. Divesh Bhatia (Department of Chemical Engineering) and Prof. T. R. Sreekrishnan (Department of Biochemical Engineering and Biotechnology) for their valuable feedback and suggestions throughout this research.

I would like to thank Prof. M. K. S. Verma (Department of Chemical Engineering) for his valuable suggestions during this research. I am extremely grateful to Prof. Amit Gupta (Department of Mechanical Engineering) and his research group for their support and providing facility for electrochemical testing. I would further like to thank the Central Research Facility, India Institute of Technology Delhi for providing material characterization facilities.

I would also like to thank the staff members of Department of Chemical Engineering, my colleagues and friends for their constant support and kind help.

Last but not least, I would like to thank my parents, husband and family for their unbounded support and encouragement throughout my research work.

I truly believe that all persons who have directly or indirectly contributed to this study whom I have not mentioned personally are aware of my deep appreciation.

(Drishti Bhatia)

ABSTRACT

The large amount of rice straw generated after harvesting of rice crop, in Northern India, is burned in the agricultural fields by the farmers due to the short time interval available for the sowing of wheat. The open air burning of rice straw (commonly known as stubble burning) poses a serious threat to the environment and health of living organisms by releasing large amounts of particulate matter and greenhouse gases, severely deteriorating air quality. Furthermore, stubble burning leads to deterioration of soil quality resulting in decrease of available nutrients for growth of subsequent crops. Considering the adverse effects of stubble burning, it is necessary to prevent it by employing sustainable methods for use of rice straw. Therefore, the objective of present study is to explore the potential of using biochar produced from pyrolysis of rice straw for production of value-added products.

The biochar can be used for various applications in diverse fields such as agriculture, electrochemistry, catalysis, environmental remediation, etc. The possible applications of biochar as an anode material for lithium-ion battery and an adsorbent for wastewater treatment have been explored.

Conventionally natural or synthetic graphite is used as an anode material in lithium-ion battery due to its high theoretical discharge capacity (372 mA.h/g) and low delithiation/lithiation potential. Rice straw, being a lignocellulosic biomass, can be converted into carbon rich biochar and its properties can be tuned to suit its application as an anode material. However, the high silica content in rice straw poses a challenge. Therefore, a method to obtain biochar containing low silica and high carbon content, by pyrolysis of rice straw has been proposed. Initially rice straw was pre-treated with potassium hydroxide to remove silica present in it. The pre-treated rice straw was pyrolyzed to produce biochar, which was then post-treated with hydrochloric acid. The modified biochar was characterized using various characterization techniques and showed an enhancement in graphitic carbon content, a key component responsible for

electrochemical behaviour. An anode was prepared using modified biochar and tested for its electrochemical performance against lithium metal as counter electrode in a 2016 type coin cell. The coin cell had a discharge capacity of 352 mA.h/g. Converting rice straw into low-silica, high-carbon biochar for lithium-ion battery anodes represents a significant innovation in sustainable energy storage technology by repurposing an agricultural waste. Moreover, achieving a discharge capacity of 352 mA.h/g highlights its potential as a viable, eco-friendly alternative to conventional graphite anodes.

Another application of rice straw biochar, as an adsorbent for removal of phenol from wastewater, was studied by performing adsorption experiments in batch and continuous mode of operation. The pristine biochar produced at different pyrolysis temperatures (300, 500, 700 and 800°C) was used as an adsorbent for removing phenol from synthetic solution and it was observed that biochar obtained at 800°C showed the maximum phenol removal efficiency owing to its maximum surface area. Further, it was observed that, a contact time of 24 h and an adsorbent dosage of 20 g/L (biochar obtained at 800°C) was required to treat 100 mg/L of phenol solution to below discharge limit (5 mg/L) as prescribed by statutory authorities. Therefore, to reduce the required contact time and adsorbent dosage, chemical modification of biochar was carried out. The modified biochar with enhanced surface area was prepared by soaking the rice straw in potassium hydroxide solution, followed by pyrolysis and post-treatment of biochar using hydrochloric acid. The response surface optimization study for removal of phenol using the modified biochar was carried out to determine the individual/interactive effects of adsorption parameters and a quadratic model equation was obtained, depicting the adsorption behaviour. It was observed that modified biochar resulted in 96 % phenol removal from 100 mg/L phenol solution in 60 min with an adsorbent dosage of 1.25 g/L. The adsorption isotherm and kinetics were studied, and the data was best fitted using Langmuir isotherm and pseudo second order kinetic model. The adsorption thermodynamics

represented an exothermic and spontaneous adsorption process. The fixed bed column studies for removal of phenol were also carried out at varying bed height, flow rate and initial phenol concentration and the column kinetic data in each experiment was best fitted using Thomas model. The removal of phenol in column mode of operation providing insights into the efficiency, capacity, and practical applicability of adsorbents in treating phenol containing wastewater. The regeneration of used adsorbent was carried out using 1 M potassium hydroxide solution and it was observed that the adsorbent could reduce phenol concentration from 100 mg/L to below discharge limit (5 mg/L) for 8 adsorption cycles. The detailed insights on desorption of phenol and regeneration of adsorbent ensures sustainable and cost-effective treatment of wastewater by maintaining or restoring adsorption capacity of adsorbent for multiple cycles of use. Further, to assess the performance of biochar in real-world scenarios removal of phenol from textile industry effluent was studied and the phenol removal efficiency of 97 % was obtained.

Further, the feasibility of utilizing rice straw derived biochar, as an adsorbent for removal of arsenic from water, was studied by carrying out adsorption experiments in batch mode. It was observed that pristine biochar and biochar obtained after modification of rice straw with potassium hydroxide resulted in an arsenic removal efficiency of < 5 % from synthetic solution having arsenic concentration of 1000 µg/L. Therefore, iron-modified biochar was produced by soaking rice straw in 1 M iron (III) chloride solution. The iron incorporated rice straw was pyrolyzed to produce iron-modified biochar which was used as an adsorbent for removal of arsenic from water. The adsorption of arsenic using iron-modified biochar was optimized using Response Surface Methodology with three adsorption parameters (contact time, adsorbent dosage, and initial arsenic concentration). It was observed that iron-modified biochar was capable of removing 99 % arsenic from aqueous solution having arsenic concentration of 989 µg/L in 72 min with an adsorbent dosage of 3.25 g/L. The adsorption kinetics and isotherm

were best fitted using pseudo second order kinetic model and Langmuir isotherm model. The surface complexation between arsenic and iron ions was considered as the main adsorption mechanism behind arsenic adsorption. The leaching of iron from iron-modified biochar into treated water was tested and found to be negligible (13.29 $\mu\text{g/L}$). Further, the disposal of exhausted adsorbent was suggested following the toxicity characteristic leaching procedure. The results demonstrated the effectiveness of iron-modified biochar in arsenic removal from water in the arsenic concentration range significantly present in ground water (10 – 1000 $\mu\text{g/L}$). Further, the results show that iron-modified biochar has high stability, with minimal leaching observed in tested samples. Apart from this, the easy disposal of used adsorbent suggested in the study enhances the economic feasibility of the process.

The present research offers several significant advantages. The conversion of rice straw into biochar, offers a sustainable solution to the widespread issue of stubble burning. The biochar obtained from rice straw can be tuned effectively and used as anode material providing a green alternative to conventional graphite. Further, the biochar serves as an effective and eco-friendly adsorbent for removal of phenol and arsenic from wastewater.

सार

उत्तरी भारत में चावल की फसल की कटाई के बाद बड़ी मात्रा में चावल के भूसे का उत्पादन होता है, जिसे किसान गेहूं की बुवाई के लिए कम समय अंतराल के कारण खेतों में जला देते हैं। चावल के भूसे को खुले में जलाना (जिसे आमतौर पर पराली जलाना कहते हैं) पर्यावरण और जीवों के स्वास्थ्य के लिए गंभीर खतरा पैदा करता है, क्योंकि इससे बड़ी मात्रा में कण पदार्थ और ग्रीनहाउस गैस निकलती हैं, जिससे हवा की गुणवत्ता खराब होती है। इसके अलावा, पराली जलाने से मिट्टी की गुणवत्ता खराब होती है, जिससे बाद की फसलों के विकास के लिए पोषक तत्वों की कमी हो जाती है। पराली जलाने के प्रतिकूल प्रभावों को देखते हुए, चावल के भूसे के उपयोग के लिए सस्टेनबल तरीकों को अपनाकर इसे रोकना आवश्यक है। इसलिए, वर्तमान अध्ययन का उद्देश्य मूल्यवर्धित उत्पादों के उत्पादन के लिए चावल के भूसे के पायरोलिसिस से उत्पादित बायोचार का उपयोग करने की संभावना का पता लगाना है।

बायोचार का उपयोग विविध क्षेत्रों जैसे कृषि, इलेक्ट्रोकेमिस्ट्री, कॅप्टीसीस, पर्यावरण उपचार आदि में विभिन्न अनुप्रयोगों के लिए किया जा सकता है। लिथियम-आयन बैटरी के लिए एनोड सामग्री के रूप में बायोचार के संभावित अनुप्रयोगों और अपशिष्ट जल उपचार के लिए एक एडसोर्बेंट का पता लगाया गया है।

पारंपरिक रूप से प्राकृतिक या सिंथेटिक ग्रेफाइट का उपयोग लिथियम-आयन बैटरी में एनोड सामग्री के रूप में किया जाता है, इसकी उच्च सैद्धांतिक निर्वहन क्षमता (372 mA.h/g) और कम डेलिथिएशन/लिथिएशन क्षमता के कारण। चावल के भूसे, एक लिग्नोसेल्यूलोसिक बायोमास होने के कारण, कार्बन समृद्ध बायोचार में परिवर्तित हो सकते हैं और इसके गुणों को एनोड सामग्री के रूप में इसके अनुप्रयोग के अनुरूप बनाया जा सकता है। हालांकि, चावल के भूसे में उच्च सिलिका सामग्री एक चुनौती है। इसलिए, चावल के भूसे के पायरोलिसिस द्वारा कम सिलिका और उच्च कार्बन सामग्री वाले बायोचार को प्राप्त करने की एक विधि प्रस्तावित की गई है। शुरू में चावल के भूसे को पोटेसियम हाइड्रॉक्साइड से उपचारित किया गया ताकि उसमें मौजूद सिलिका को हटाया जा सके। पहले से उपचारित चावल के भूसे को बायोचार बनाने के लिए पाइरोलाइज किया गया, जिसे बाद में हाइड्रोक्लोरिक एसिड से उपचारित किया गया। संशोधित बायोचार को विभिन्न अभिलक्षण तकनीकों का उपयोग करके अभिलक्षित किया गया और इसमें इलेक्ट्रोकेमिकल व्यवहार के लिए जिम्मेदार एक प्रमुख घटक, ग्रेफाइटिक कार्बन सामग्री में वृद्धि देखी गई। संशोधित बायोचार का उपयोग करके एक एनोड तैयार किया गया और 2016 प्रकार के कॉइन सेल में काउंटर इलेक्ट्रोड के रूप में लिथियम धातु के खिलाफ इसके इलेक्ट्रोकेमिकल प्रदर्शन के लिए परीक्षण किया गया। कॉइन सेल की डिस्चार्ज क्षमता 352 mA.h/g थी। चावल के भूसे को लिथियम-आयन बैटरी एनोड के लिए कम-सिलिका, उच्च-कार्बन

बायोचार में परिवर्तित करना कृषि अपशिष्ट को फिर से उपयोग करके सस्टेनबल ऊर्जा भंडारण प्रौद्योगिकी में एक महत्वपूर्ण नवाचार का प्रतिनिधित्व करता है। इसके अलावा, 352 mA.h/g की डिस्चार्ज क्षमता प्राप्त करना पारंपरिक ग्रेफाइट एनोड के लिए एक व्यवहार्य, पर्यावरण के अनुकूल विकल्प के रूप में इसकी क्षमता को उजागर करता है।

चावल के भूसे के बायोचार का एक और अनुप्रयोग, अपशिष्ट जल से फिनोल को हटाने के लिए एक एडसोर्बेंट के रूप में, बैच और कॉन्टिन्युअस मोड में ऐड्सॉर्प्शन प्रयोगों का प्रदर्शन करके अध्ययन किया गया था। विभिन्न पायरोलिसिस तापमान (300, 500, 700 और 800°C) पर उत्पादित प्राचीन बायोचार का उपयोग सिंथेटिक घोल से फिनोल को हटाने के लिए एक एडसोर्बेंट के रूप में किया गया था और यह देखा गया कि 800°C पर प्राप्त बायोचार ने अपने अधिकतम सतह क्षेत्र के कारण अधिकतम फिनोल हटाने की दक्षता दिखाई। इसके अलावा, यह देखा गया कि, 100 mg/L फिनोल घोल को वैधानिक अधिकारियों द्वारा निर्धारित निर्वहन सीमा (5 mg/L) से नीचे तक उपचारित करने के लिए 24 घंटे का संपर्क समय और 20 mg/L (800°C पर प्राप्त बायोचार) की एडसोर्बेंट डोज़ की आवश्यकता थी। इसलिए, आवश्यक संपर्क समय और एडसोर्बेंट डोज़ को कम करने के लिए, बायोचार का रासायनिक संशोधन किया गया। उन्नत सतह क्षेत्र के साथ संशोधित बायोचार को चावल के भूसे को पोटेशियम हाइड्रोक्साइड के घोल में भिगोने, उसके बाद पायरोलिसिस और हाइड्रोक्लोरिक एसिड का उपयोग करके बायोचार का उपचार करके तैयार किया गया। संशोधित बायोचार का उपयोग करके फिनोल को हटाने के लिए प्रतिक्रिया सतह पद्धति अध्ययन को ऐड्सॉर्प्शन मापदंडों के व्यक्तिगत/अंतःक्रियात्मक प्रभावों को निर्धारित करने के लिए किया गया था और अधिशोषण व्यवहार को दर्शाते हुए एक द्विघात मॉडल समीकरण प्राप्त किया गया था। यह देखा गया कि संशोधित बायोचार के परिणामस्वरूप 1.25 g/L की एडसोर्बेंट डोज़ के साथ 60 मिनट में 100 mg/L फिनोल घोल से 96% फिनोल हटा दिया गया। ऐड्सॉर्प्शन समतापी और गतिकी का अध्ययन किया गया, और डेटा को लैंगमुअर समतापी और छद्म द्वितीय क्रम गतिज मॉडल का उपयोग करके सबसे अच्छा फिट किया गया। ऐड्सॉर्प्शन ऊष्मागतिकी ने एक ऊष्माक्षेपी और स्वतःस्फूर्त ऐड्सॉर्प्शन प्रक्रिया का प्रतिनिधित्व किया। फिनोल को हटाने के लिए फिक्स्ड-बेड कॉलम अध्ययन भी अलग-अलग बेड की ऊंचाई, प्रवाह दर और प्रारंभिक फिनोल की मात्रा पर किए गए थे और प्रत्येक प्रयोग में स्तंभ गतिज डेटा थॉमस मॉडल का उपयोग करके सबसे अच्छा फिट किया गया था। संचालन के कॉलम मोड में फिनोल को हटाने से फिनोल युक्त अपशिष्ट जल के उपचार में ऐड्सॉर्प्शन की दक्षता, क्षमता और व्यावहारिक प्रयोज्यता के बारे में जानकारी मिलती है। प्रयुक्त एडसोर्बेंट का पुनर्जनन 1 M पोटेशियम हाइड्रोक्साइड घोल का उपयोग करके किया गया था और यह देखा गया था कि एडसोर्बेंट 8 ऐड्सॉर्प्शन चक्रों के लिए फिनोल सांद्रता को 100 mg/L से निर्वहन

सीमा (5 mg/L) से नीचे तक कम कर सकता है। फिनोल के डीसॉर्प्शन और एडसोर्बेंट के पुनर्जनन पर विस्तृत जानकारी उपयोग के कई चक्रों के लिए एडसोर्बेंट की ऐड्सॉर्प्शन क्षमता को बनाए रखने या पुनर्स्थापित करके अपशिष्ट जल के सस्टेनबल और लागत प्रभावी उपचार को सुनिश्चित करती है। इसके अलावा, वास्तविक दुनिया के परिदृश्यों में बायोचार के प्रदर्शन का आकलन करने के लिए कपड़ा उद्योग के अपशिष्ट से फिनोल को हटाने का अध्ययन किया गया और 97% की फिनोल हटाने की दक्षता प्राप्त की गई।

इसके अलावा, चावल के भूसे से प्राप्त बायोचार को पानी से आर्सेनिक हटाने के लिए एक एडसोर्बेंट के रूप में उपयोग करने की व्यवहार्यता का अध्ययन बैच मोड में ऐड्सॉर्प्शन प्रयोगों के द्वारा किया गया था। यह देखा गया कि प्रिस्टिन बायोचार और पोटैशियम हाइड्रॉक्साइड के साथ चावल के भूसे के संशोधन के बाद प्राप्त बायोचार के परिणामस्वरूप 1000 µg/L आर्सेनिक सांद्रता वाले सिंथेटिक घोल से आर्सेनिक हटाने की दक्षता < 5% थी। इसलिए, चावल के भूसे को 1 M आयरन (III) क्लोराइड घोल में भिगोकर आयरन-संशोधित बायोचार का उत्पादन किया गया। आयरन युक्त चावल के भूसे को पाइरोलाइज्ड करके आयरन-संशोधित बायोचार का उत्पादन किया गया जिसका उपयोग पानी से आर्सेनिक हटाने के लिए एक एडसोर्बेंट के रूप में किया गया यह देखा गया कि आयरन-संशोधित बायोचार 3.25 g/L की एडसोर्बेंट डोज के साथ 72 मिनट में 989 µg/L आर्सेनिक सांद्रता वाले जलीय घोल से 99% आर्सेनिक को हटाने में सक्षम था। अधिशोषण गतिकी और समतापी को छद्म द्वितीय क्रम गतिज मॉडल और लैंगमुइर समतापी मॉडल का उपयोग करके सबसे अच्छा फिट किया गया था। आर्सेनिक और आयरन आयनों के बीच सतही जटिलता को आर्सेनिक ऐड्सॉर्प्शन के पीछे मुख्य ऐड्सॉर्प्शन तंत्र माना जाता था। उपचारित जल में आयरन-संशोधित बायोचार से आयरन के निक्षालन का परीक्षण किया गया और पाया गया कि यह नगण्य (13.29 µg/L) है। इसके अलावा, विषाक्तता विशेषता लीचिंग प्रक्रिया का पालन करते हुए इग्ज़ॉस्टिड एडसोर्बेंट का निपटान करने का सुझाव दिया गया। परिणामों ने भूजल में महत्वपूर्ण रूप से मौजूद आर्सेनिक सांद्रता सीमा (10 - 1000 µg/L) में पानी से आर्सेनिक हटाने में आयरन-संशोधित बायोचार की प्रभावशीलता को प्रदर्शित किया। इसके अलावा, परिणाम बताते हैं कि आयरन-संशोधित बायोचार में उच्च स्थिरता है, परीक्षण किए गए नमूनों में न्यूनतम निक्षालन देखा गया है। इसके अलावा, अध्ययन में सुझाए गए उपयोग किए गए एडसोर्बेंट के आसान निपटान से प्रक्रिया की आर्थिक व्यवहार्यता बढ़ जाती है।

वर्तमान शोध कई महत्वपूर्ण लाभ प्रदान करता है। चावल के भूसे को बायोचार में बदलना, पराली जलाने की व्यापक समस्या का एक स्थायी समाधान प्रदान करता है। चावल के भूसे से प्राप्त बायोचार को प्रभावी ढंग से ट्यून किया जा सकता है और पारंपरिक ग्रेफाइट के लिए

एक हरित विकल्प प्रदान करते हुए एनोड सामग्री के रूप में उपयोग किया जा सकता है। इसके अलावा, बायोचार अपशिष्ट जल से फिनोल और आर्सेनिक को हटाने के लिए एक प्रभावी और इको-फ्रेंडली एडसोर्बेंट के रूप में कार्य करता है।

TABLE OF CONTENTS

CERTIFICATE.....	i
ACKNOWLEDGEMENTS	ii
ABSTRACT.....	iii
TABLE OF CONTENTS	xi
LIST OF FIGURES	xvi
LIST OF TABLES	xix
ABBREVIATIONS.....	xxi
NOMENCLATURE.....	xxii
CHAPTER 1: INTRODUCTION	1
1.1 Stubble burning a choice or a necessity for the farmers	3
1.2 Harmful effects of stubble burning	5
1.3 Statement of problem and objectives	10
1.4 Organization of thesis.....	13
CHAPTER 2: LITERATURE REVIEW	16
2.1 In-situ management of rice straw	16
2.2 Ex-situ management of rice straw	17
2.3 Potential applications of rice straw	18
2.4 Initiatives by the governmental agencies	21
2.5 Pyrolysis of rice straw	22
2.5.1 Possible applications of bio-oil and non-condensable gases	23

2.5.2 Possible applications of biochar	24
2.5.2.1 Possible application of biochar in electrochemical energy storage devices	26
2.5.2.2 Possible application of biochar in wastewater treatment.....	40
2.5.2.2.1 Removal of phenol using biochar as an adsorbent	50
2.5.2.2.2 Removal of arsenic using biochar as an adsorbent.....	55
2.6 Gaps in literature	61
CHAPTER 3: USE OF RICE STRAW DERIVED BIOCHAR AS AN ANODE MATERIAL FOR LITHIUM-ION BATTERY	63
3.1 Background	63
3.2 Materials and Methods	64
3.2.1 Materials	64
3.2.2 Synthesis of biochar.....	65
3.2.2.1 Pyrolysis of rice straw	65
3.2.2.2 Modification of biochar	66
3.2.3 Characterization of biochar	70
3.2.4 Electrode preparation and cell assembly	71
3.2.5 Electrochemical measurements	71
3.3 Results and Discussion.....	72
3.3.1 Characterization of biochar	72
3.3.2 Electrochemical measurement and battery performance.....	83
3.4 Broader perspective.....	89

CHAPTER 4: USE OF RICE STRAW DERIVED BIOCHAR AS AN ADSORBENT FOR REMOVAL OF PHENOL FROM WASTEWATER.....	91
4.1 Background	91
4.2 Materials and Methods.....	91
4.2.1 Materials	91
4.2.2 Synthesis of biochar.....	91
4.2.3 Batch adsorption study	92
4.2.3.1 Selection of adsorbent for removal of phenol	92
4.2.3.2 Optimization of adsorption parameters for removal of phenol	93
4.2.3.3 Adsorption kinetics, isotherm, and thermodynamics.....	94
4.2.4 Column adsorption study.....	97
4.2.5 Adsorbent regeneration study	101
4.2.6 Adsorption mechanism	101
4.2.7 Treatment of industrial effluent	102
4.3 Results and Discussion.....	102
4.3.1 Selection of adsorbent for removal of phenol	102
4.3.2 Optimization of adsorption parameters for removal of phenol	105
4.3.3 Adsorption kinetics, isotherm and thermodynamics.....	112
4.3.4 Column adsorption study.....	117
4.3.5 Adsorbent regeneration study	124
4.3.6 Adsorption mechanism	126
4.3.7 Treatment of industrial effluent	128

4.4 Disposal of exhausted adsorbent	130
4.5 Broader perspective	131
CHAPTER 5: USE OF RICE STRAW DERIVED BIOCHAR AS AN ADSORBENT FOR REMOVAL OF ARSENIC FROM WATER.....	134
5.1 Background	134
5.2 Materials and Methods	135
5.2.1 Materials	135
5.2.2 Synthesis of biochar.....	135
5.2.3 Characterization of iron-modified biochar	135
5.2.4 Selection of adsorbent for removal of arsenic	136
5.2.5 Optimization of adsorption parameters for removal of arsenic	137
5.2.6 Adsorption kinetics and isotherm	138
5.3 Results and Discussion.....	139
5.3.1 Characterization of iron-modified biochar	139
5.3.2 Selection of adsorbent for removal of arsenic	142
5.3.3 Optimization of adsorption parameters for removal of arsenic	144
5.3.4 Adsorption kinetics and isotherm	150
5.3.5 Adsorption mechanism	153
5.3.6 Leaching of iron.....	154
5.4 Disposal of exhausted adsorbent	155
5.5 Broader perspective.....	155

CHAPTER 6: CONCLUSIONS AND SCOPE FOR FUTURE WORK.....	159
6.1 Conclusions	159
6.2 Scope for future work.....	161
REFERENCES	165
APPENDIX.....	211
LIST OF PUBLICATIONS.....	215
PATENT	215
BIODATA	216

LIST OF FIGURES

Figure No.	Title	Page No.
Figure 1.1:	Methods of rice straw management	2
Figure 3.1:	Working of a lithium-ion battery	63
Figure 3.2:	Schematic diagram of pyrolysis setup	66
Figure 3.3:	Schematic representation of various methods used to produce modified biochar	67
Figure 3.4:	SEM images of biochar (a) B800;	78
	(b) B3:1;	78
	(c) B4:1	79
Figure 3.5:	(a) XRD; (b) FTIR; (c) Raman spectrum of biochar B800, B3:1 and B4:1	82
Figure 3.6:	CV curve of coin cell assembled using anode prepared from biochar B4:1 in voltage range of 0 – 3 V at scan rate of 0.05 mV/s	84
Figure 3.7:	(a) Charge/discharge profile of coin cell;	85
	(b) Discharge capacity and coulombic efficiency of coin cell assembled using anode prepared from biochar B4:1 during continuous cycling	85
Figure 3.8:	Rate capability analysis of coin cell prepared from biochar B4:1 at different C rates	86
Figure 3.9:	SEM images of fresh and used anode	87
Figure 3.10:	EIS of fresh and used coin cell	88
Figure 4.1:	Fixed bed adsorption column setup	98
Figure 4.2:	Selection of adsorbent for removal of phenol (a) Biochar produced at different pyrolysis temperatures for removal of 100 mg/L phenol from synthetic solution at an adsorbent dosage of 2 g/L;	104
	(b) Pristine biochar obtained from pyrolysis at 800°C for removal of 100 mg/L phenol from synthetic solution at varying adsorbent dosage;	104
	(c) Modified biochar for removal of 100 mg/L phenol from synthetic solution at an adsorbent dosage of 2 g/L	105

Figure 4.3:	Contour plots showing the interactive effect of adsorption parameters on removal of phenol	
	(a) Phenol removal efficiency vs adsorbent dosage and contact time	109
	(b) Phenol removal efficiency vs initial phenol concentration and contact time	109
	(c) Phenol removal efficiency vs initial solution pH and contact time	110
	(d) Phenol removal efficiency vs initial phenol concentration and adsorbent dosage	110
	(e) Phenol removal efficiency vs initial solution pH and adsorbent dosage	111
	(f) Phenol removal efficiency vs initial solution pH and initial phenol concentration	111
Figure 4.4:	Response optimization graph for removal of phenol	112
Figure 4.5:	(a) Experimental and predicted values of adsorption capacity at different time intervals; (b) IPD model fitting	114
Figure 4.6:	Experimental and predicted values of adsorption capacity at different initial phenol concentrations	116
Figure 4.7:	Plot of change in Gibbs free energy versus temperature	117
Figure 4.8:	Breakthrough curve for removal of phenol (a) effect of bed height; (b) effect of flowrate; (c) effect of initial phenol concentration	121
Figure 4.9:	Regeneration of adsorbent (a) effect of KOH concentration; (b) effect of contact time; (c) effect of regeneration volume; (d) Phenol removal efficiency after various cycles of dsorption/desorption	126
Figure 4.10:	(a) FTIR plot of fresh and used adsorbent (b) Point of zero charge of fresh adsorbent	128
Figure 4.11:	Treatment of industrial effluent containing phenol. (a) Phenol removal efficiency and (b) COD removal efficiency at varying adsorbent dosage in batch mode. (c) Breakthrough curve for removal of phenol and COD from industrial effluent	130
Figure 5.1:	(a) XRD; (b) FTIR plot of pristine and iron-modified biochar	140
Figure 5.2:	SEM images of biochar (a) B800; (b) Fe-B800	141

Figure 5.3:	Selection of adsorbent for removal of arsenic	144
Figure 5.4:	Contour plots showing the interactive effect of adsorption parameters on removal of arsenic	
	(a) Arsenic removal efficiency vs adsorbent dosage and contact time	148
	(b) Arsenic removal efficiency vs initial arsenic concentration and contact time	148
	(c) Arsenic removal efficiency vs initial arsenic concentration and adsorbent dosage	149
	(d) Histogram of residual	149
Figure 5.5	Response optimization graph for removal of arsenic	150
Figure 5.6:	(a) Experimental and predicted values of adsorption capacity at different time intervals; (b) IPD model fitting	151
Figure 5.7:	Experimental and predicted values of adsorption capacity at different initial arsenic concentrations	153
Figure 5.8:	FITR plot of fresh and used adsorbent	154

LIST OF TABLES

Table No.	Title	Page No.
Table 1.1:	Amount of pollutants released by burning of rice straw	6
Table 1.2:	Air Quality Index in Delhi in November 2023	7
Table 1.3:	Adverse effect of air pollution on human health	9
Table 2.1:	Use of biochar derived from various biomass sources as an anode material for lithium-ion battery	30
Table 2.2:	Use of biochar derived from rice residue as an anode material for lithium-ion battery	37
Table 2.3:	Use of rice straw derived biochar as an adsorbent for wastewater treatment	44
Table 2.4:	Removal of phenol using biochar derived from different biomass sources	51
Table 2.5:	Removal of arsenic using biochar derived from different biomass sources	58
Table 3.1:	Surface area of biochar synthesized from rice straw by different methods	74
Table 3.2:	EDX analysis of biochar B800, B3:1 and B4:1	76
Table 3.3:	CHNS analysis of biochar B800, B3:1 and B4:1	77
Table 3.4:	Electrochemical performance of biochar obtained from various biomass sources	90
Table 4.1:	Coded level of independent variables selected for batch experiments	93
Table 4.2:	Analysis of Variance for removal of phenol using Response Surface Methodology	107
Table 4.3:	Kinetic model parameters	114
Table 4.4:	Isotherm model parameters	115
Table 4.5:	Column adsorption parameters calculated at various operating conditions	120
Table 4.6:	Thomas kinetics model parameters calculated at various operating parameters	123
Table 4.7:	Characteristics of industrial effluent	128

Table 4.8:	Phenol removal efficiency of biochar obtained from various biomass sources	132
Table 5.1:	Coded levels of independent variables selected for batch experiment	137
Table 5.2:	EDX analysis of biochar B800 and Fe-B800	142
Table 5.3:	Analysis of variance for removal of arsenic using Response Surface Methodology	147
Table 5.4:	Kinetic model parameters	151
Table 5.5:	Isotherm model parameters	152
Table 5.6:	Arsenic removal efficiency of biochar obtained from various biomass sources	157

ABBREVIATIONS

AQI: Air Quality Index

BET: Brunauer - Emmett - Teller

BJH: Barrett - Joyner - Halenda

CEC: Cation Exchange Capacity

CHNS: Carbon Hydrogen Nitrogen Sulphur

COD: Chemical Oxygen Demand

CV: Cyclic Voltammetry

DFT: Density Functional Theory

EDX: Energy Dispersive X-ray

FTIR: Fourier Transform Infrared Spectroscopy

GCD: Galvanostatic Charge Discharge

GVA: Gross Value Added

IARI: Indian Agricultural Research Institute

PM_{2.5}: Particulate Matter (particle size: 2.5 microns or below)

PM₁₀: Particulate Matter (particle size: 10 microns or below)

USEPA: United States Environmental Protection Agency

SEI: Solid Electrolyte Interphase

SEM: Scanning Electron Microscopy

SMS: Straw Management System

TDS: Total Dissolved Solids

TSS: Total Suspended Solids

TOC: Total Organic Carbon

WHO: World Health Organization

XRD: X-ray Diffraction

NOMENCLATURE

AER: Adsorbent Exhaustion Rate

BX00: Pristine biochar obtained from pyrolysis of rice straw at X00°C (300, 500, 700 or 800°C)

B1:X: Modified biochar obtained from pyrolysis (800°C) of rice straw pre-treated using Method 1 with X molar potassium hydroxide solution (X: 0.1, 0.5 or 1)

B2:X: Modified biochar obtained from pyrolysis (800°C) of rice straw pre-treated using Method 2 with X molar potassium hydroxide solution (X: 0.1, 0.5 or 1)

B3:X: Modified biochar obtained from pyrolysis (800°C) of rice straw pre-treated using Method 3 with X molar potassium hydroxide solution (X: 0.1, 0.5 or 1)

B4:1: Modified biochar obtained from pyrolysis (800°C) of rice straw pre-treated using Method 4 with 1 molar potassium hydroxide solution

BTX: Benzene Toluene Xylene

DMC: Dimethyl Carbonate

EC: Ethylene Carbonate

Fe-B800: Iron-modified Biochar

HR: Heating Rate

IPD: Intraparticle Diffusion

LAB: Lead - Acid Battery

LCB: Lead - Carbon Battery

LIB: Lithium - Ion Battery

MAB: Metal - Air Battery

MTZ: Mass Transfer Zone

NMP: N-methyl-2-pyrrolidine

PAHs: Polyaromatic Hydrocarbons

PCBs: Polychlorinated Biphenyls

PFO: Pseudo First Order

pH_{zc}: Point of Zero Charge

PSO: Pseudo Second Order

PVDF: Polyvinylidene Fluoride

SIB: Sodium - Ion Battery

SSB: Sodium - Sulphur Battery