The approximation of X-ray diffraction profiles have been carried out by the following expression:

4

*P*

2 *A* (2θ )

*I* (2θ)  *P*0    *k*   i .

(2θ)k

π (4( 2θ - 2θ i ) 2  ((2θi )) 2 )

*k* 1

*i*

Lorentzian parameters and polynomial parameters are given in the following tables.

12,09

4,13

6,06

13,74

6,81

i

Lorentzian parameters

Sample name

К3–360

К6–500

К7–630

К8–630

К9–630

К10–950

К13–1050

К13–1300

1

(**γ-band**)

2θ

Δ(2θ)

*A*

20,34

17,74

82811

17,96

9,57

2164

18,56

9,70

7846

20,39

12,36

33001

22,48

39171

2

**(002)**

2θ

Δ(2θ)

*A*

22,31

14,43

44056

24,01

12,95

33010

24,19

11,94

26363

24,00

12,05

35495

24,49

8,11

20197

22,98

12,27

53512

25,78

2918

3

2θ

Δ(2θ)

*A*

26,04

0,41

250

26,03

0,34

124

4

2θ

Δ(2θ)

*A*

34,50

0,67

110,00

5

2θ

Δ(2θ)

*A*

37,03

0,71

190,61

36,86

1,23

198,30

37,10

1,20

140,00

37,30

1,63

837,28

36,81

2,77

1700,08

6

2θ

Δ(2θ)

*A*

39,62

0,71

302

39,36

0,24

17

39,37

0,22

82

7

2θ

Δ(2θ)

*A*

41,88

0,25

79

8

**(10)**

2θ

Δ(2θ)

*A*

42,20

17,51

13651

44,58

12,18

6967

44,08

14,71

10524

43,98

13,97

9827

43,84

13,23

12706

43,46

4,89

6501

43,80

5,92

5613

43,40

6024

9

2θ

Δ(2θ)

*A*

43,33

1,62

437

10

2θ

Δ(2θ)

*A*

46,29

4,97

2053

11

**(004)**

2θ

Δ(2θ)

*A*

54,16

30,78

13579

56,04

27,30

9992

53,48

1,03

223

53,36

1,12

142

53,89

12,79

2683

52,17

11,26

5205

48,04

26,04

17041

52,46

3569

12

2θ

Δ(2θ)

*A*

60,35

18,88

6273

60,50

20,96

7021

62,88

14,30

3131

62,30

9,59

3091

62,60

21,30

4500

61,83

3,92

906

13

2θ

Δ(2θ)

*A*

62,34

1,65

57

61,60

0,20

35

14

2θ

Δ(2θ)

*A*

68,10

0,38

24

15

2θ

Δ(2θ)

*A*

74,69

2,28

189

74,50

2,18

360

16

**(11)**

2θ

Δ(2θ)

*A*

81,56

46,45

24342

83,27

28,65

9335

80,74

9,17

952

80,20

11,46

1654

80,12

13,61

2568

79,51

10,84

4991

79,84

10,92

3808

78,89

1747

Polynomial parameters

Sample name

К3–360

К6–500

К7–630

К8–630

К9–630

К10–950

К13–1050

К13–1300

*P* 0

*P* 1

*P* 2

*P* 3

*P* 4

-20,7

1641

69502

0

0

-24,5

18403

-207086

1952050

0

468,9

-22025

651035

-2752983

0

428,9

-24554

935208

-4515245

0

538,3

-28347

841742

-3865040

0

584,5

-39046

1226625

-6128435

0

539,2

-37408

816824

-2710831

0

53,7

39124

-1815893

29385239

-133212271