引文格式：张兵, 许德喜, 李细锋. 扩散连接理论与数值模拟研究进展：从界面演变机制到工艺预测[J]. 航空制造技术, 2026, 69(20): 26010025.

ZHANG Bing, XU Dexi, LI Xifeng. Research progress in diffusion bonding theory and numerical simulation: From interfacial evolution mechanisms to process prediction[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2026, 69(20): 26010025.

扩散连接理论与数值模拟研究进展：从界面演变机制到工艺预测

张 兵，许德喜，李细锋

（上海交通大学，上海 200030）

[摘要] 扩散连接是一种典型固相连接工艺，具有低缺陷、高致密并可实现异种材料/多层一体化制造等优势，广泛用于航空航天等高端装备。其连接质量由界面真实接触建立、孔洞闭合、原子扩散与界面消失及成分均匀化等过程共同决定。本文综述了扩散连接的相关理论模型和数值模拟方法，重点分析了不同理论模型的物理内涵和使用范围，总结了有限元、分子动力学与相场等数值模拟在界面演化和工艺预测中的研究进展，并进一步讨论了两者的协同作用。指出当前在真实界面状态描述、多尺度耦合及预测稳定性方面仍面临的挑战，对扩散连接由机理认知向工艺预测的转变进行了展望。

关键词：扩散连接；理论模型；数值模拟；轻量化；一体化制造

中图分类号：V2；TG453.9 **文献标志码：**A **DOI：**10.16080/j.issn1671-833x.26010025



张 兵

助理研究员，研究方向为材料设计与制备、材料成形与连接。

针对兼具经济性与生态可持续性的轻量化结构设计理念，先进焊接技术在复杂轻量化构件的制造中发挥着关键作用[1-2]。焊接制造的主要目的在于将满足服役要求的材料有效组合，同时实现低成本、高效率以及环境可持续性[3-4]。与传统的铆接和螺接方式相比，焊接通过形成连续的冶金连接，在减重、结构刚度、密封性能以及载荷传递连续性等方面具有明显优势[5-7]。相较于熔焊等传统焊接方式，扩散连接作为一种典型的固相连接技术，在连接过程中无需经历宏观熔化与凝固过程，能够有效避免焊接缺陷的产生，如气孔、热裂纹及凝固偏析等[8]。同时，在异种材料连接、复杂结构及多层构件整体制造方面展现出独特优势[9]。尽管已有大量研究围绕扩散连接接头及构件开展了系统的试验表征与性能评估，但仍未充分揭示其内在连接机理及界面演化规律[10]。

本文对扩散连接理论和数值模拟展开系统综述，重点围绕界面接触与孔洞闭合、原子扩散与界面消失及多机制协同作用等关键物理过程，梳理相关理论模型的基本假设、物理内涵及适用范围。在此基础上，总结有限元、分子动力学及相场等数值模拟方法在扩散连接研究中的应用进展，分析不同尺度模型在界面演化表征与工艺预测中的优势与局限。通过系统对比理论模型与数值模拟的内在联系，旨在为扩散连接由机理认知向工艺预测的转变提供清晰的框架与思路。为了更加清晰地展示本文

收稿日期：2026-02-27；**退修日期：**2026-03-16；**录用日期：**2026-04-01

通信作者：李细锋，研究员，博士，研究方向为轻质高强板材先进塑性成形技术基础与应用。

的整体结构及各部分之间的逻辑关系，图1给出了本文从界面演化机制、理论模型、数值模拟到工艺预测与工程应用的总体分析框架。

1 扩散连接理论模型

扩散连接是在一定温度和一定压力条件下，通过原子扩散与界面演化实现冶金结合的固相连接过程，其连接形成不依赖于宏观熔化与凝固（图2[11]）。通常认为，扩散连接过程可概括为界面接触、冶金结合以及成分均匀化等阶段[11]。然而，这些物理过程在实际连接过程中并非严格依次发生，而是相互耦合、交叠演化，其主导机制受材料本征特性、界面状态及工艺参数等多因素共同影响。另外，扩散连接是在密封的装置中完成，无法实时观测其过程。因此，建立合理的理论模型是更加深入理解扩散连接物理过程的重要证明。

1.1 界面接触与孔洞闭合模型

扩散连接的首要前提是实现界面紧密接触，而从微尺度上看，待焊表面不可避免的凸凹不平使得初始接触仅发生在少量微凸体处。因此，早期理论模型将扩散连接的起始阶段理想化为微凸体在外部载荷下的压平过程，并据此推导出达到充分接触时所需的工艺参数。Hamilton[12]研究钛合金扩散连接时明确提出，界面微变形是扩散连接的必要环节，并将压力作用下压平界面微凸体，闭合间隙来增加真实接触面积作为接触建立的核心机理，从而建立了优化工艺参数的解析模型。随后，Garmong等[13]进一步围绕如何达到完全界面接触展开分析，强调了真实接触面积随界面微变形逐步扩展的动力学过程，并将其作为后续冶金结合形成的前置条件。这类模型的共同特点是以微凸体几何与高温变形能力为核心，把接触的建立视为决定后续连接质量的先决条件。

在界面初始接触建立之后，残余孔洞的消除成为实现连续冶金结合的关键步骤。在较高外加载荷或相对较低温度条件下，由于蠕变与扩散机制尚未显著激活，界面局部应力难以及时松弛，该微区域所承受的应力可迅速超过材料的屈服强度，此时孔洞闭合主要受塑性变形机制控制[13–14]。Derby等[15]率先基于理想化孔洞几何分布与均匀外加压力假设，建立了解析塑性模型，明确指出当界面局部应力超过临界阈值时，孔洞可通过周围材料的塑性流动发生快速塌陷，从而在扩散连接早期阶段主导界面真实接触面积的快速增长。随后，Hill等[16]在该模型基础上对孔洞几何描述与塑性流动条件进行了进一步规范化与推广，使塑性变形主导的孔洞闭合过程能够在更广泛的应力状态下进行定量预测，并明确了其在特定工艺窗口内对界面孔洞初始闭合行为的适用范围。然而，塑性变形主导模型的适用性通常受限于温度和时间，在高温和长时间的连接条件下需与其他变形机制共同考虑。

与高应力或相对较低温度条件下塑性变形主导的孔洞闭合行为不同，扩散连接通常采用的条件为高温、较低外加载荷及较长保温时间，界面孔洞的演化过程表现出显著的时间依赖性，此时蠕变变形逐渐成为主导机制。早期的蠕变主导模型通常采用理想化的孔洞几何形貌描述，但将孔洞闭合过程视为与时间相关的蠕变流动所控制。Hamilton[12]在研究钛合金扩散连接时率先提出界面微凸体与孔洞消除主要通过高温蠕变变形实现，并据此建立了连接压力、温度与保温时间之间的定量关系，为蠕变主导孔洞闭合模型奠定了理论基础。随后，Derby等[17]在统一

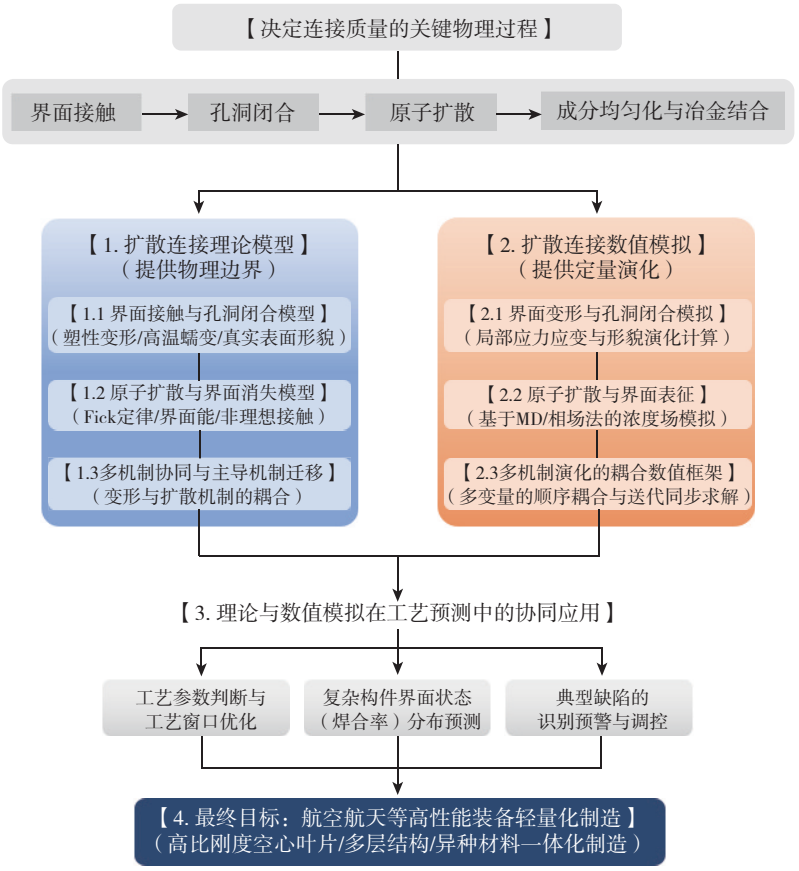
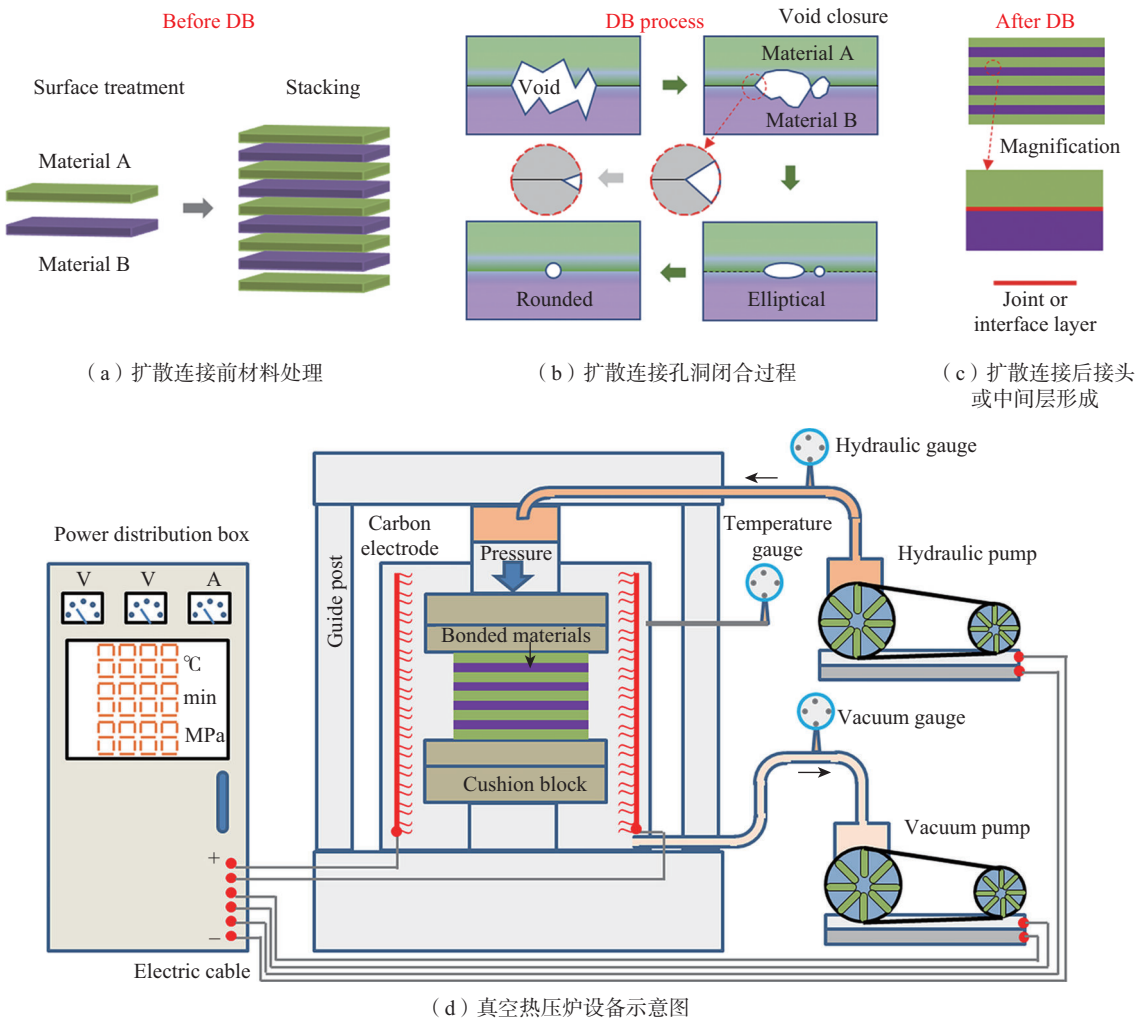


图1 本文逻辑框架及扩散连接研究路径示意图

Fig.1 Logical framework of this review and schematic illustration of the research pathway for diffusion bonding



（a）扩散连接前材料处理　（b）扩散连接孔洞闭合过程　（c）扩散连接后接头或中间层形成

（d）真空热压炉设备示意图

图2　扩散连接示意图[11]

Fig.2　Schematic illustration of diffusion bonding [11]

的理论框架下系统分析了塑性与蠕变机制在不同工艺条件下的相对重要性，指出在高温、长时间条件下，孔洞闭合过程将逐渐由蠕变机制所主导，其闭合动力学可通过幂律蠕变关系进行描述。总体而言，蠕变主导模型能够有效描述高温、长时间条件下界面孔洞的渐进式闭合过程，但其预测精度对材料蠕变参数和界面状态高度相关，在中等温度或应力区间内通常需要与塑性变形机制进行耦合考虑。

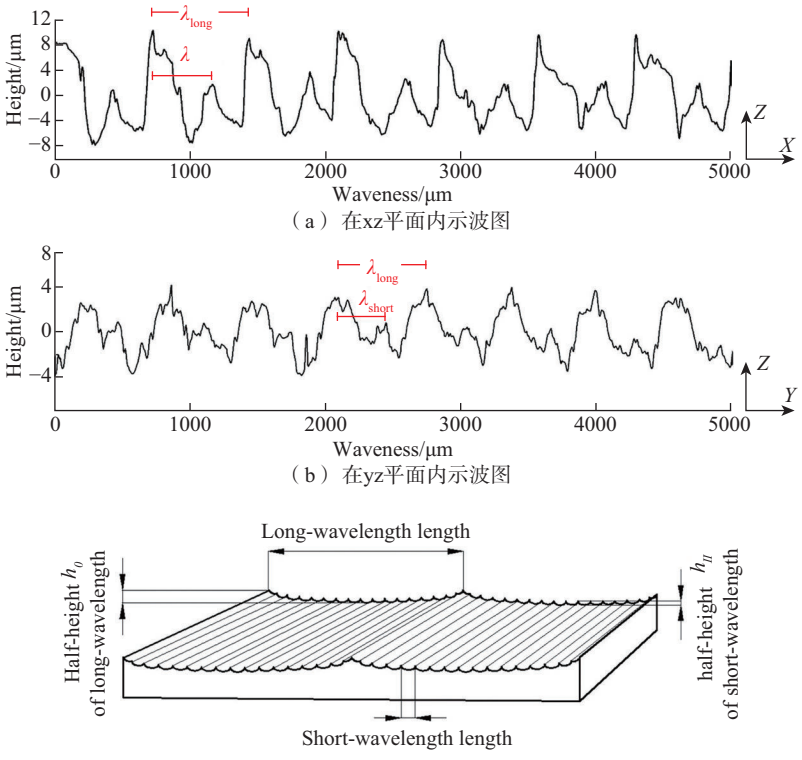
在实际扩散连接的工艺窗口内，界面孔洞闭合并非由单一机制全程控制，在加载初期，局部应力集中使界面发生快速微变形，塑性流动对接触面积增长与初始孔洞闭合贡献更为显著。随着真实接触面积扩大，高温蠕变主导应力松弛与体积收缩过程。耦合模型的关键不在于将塑性与蠕变简单叠加，而在于描述主导机制在连接过程中的迁移与相互制约。因此，孔洞闭合的控制变量应同时包含瞬时变形能力与时间依赖变形能力。近年来，界面接触与孔洞闭合模型的一个显著趋势是由早期理想化微凸体描述逐步转向真实表面形貌输入和多尺度粗糙度表征。Wu等[18]提出基于真实表面形貌的数学模型，并用长波和短波粗糙度叠加来表征实际待焊表面，进而预测孔洞闭合时间、焊合率与孔洞分布状态。通过算例验证，模型预测的孔洞尺寸和分布与试验结果一致，在焊合率预测中，最大偏差和标准偏差分别为13.5%和7.3%，该工作显著增强了模型的可用性与可迁移性（图3[18]）。在此基础上，近年的模型更加重视将工艺参数以无量纲形式纳入统一表述，以增强不同材料与不同温度区间下的适用性。Peng等[14]通过引入归一化温度和归一化压力，将实际工艺参数无量纲化到材料在连接温度下的变形能力上，从而构建了解析计算框架，并通过有限元分析与试验进行验证，提出孔洞闭合中塑性变形贡献与归一化连接压力呈线性关系，其斜率为$\sqrt{3}$，该线性关系适用于TC4、纯铜C11000、铝合金AA6061、不锈钢SUS304、镍基合金Inconel 617，该研究为扩散连接工艺窗口的快速估算

提供了有效的模型化工具。

与此同时，孔洞闭合模型在动力学可解释性方面也取得了明显进步，研究者不再满足于仅给出闭合时间或焊合率的经验拟合，而是尝试区分并量化不同机制对闭合的贡献，尤其是在异种材料或表面粗糙度不对称条件下的可预测描述。Chang等[19]提出用于异种材料扩散连接的综合模型，以正弦轮廓表征孔洞形貌，考虑孔洞尖端的原子累积并引入表面扩散的局部效应以量化其贡献，从而避免既有模型中不现实的孔洞演化。进一步，在应力与浓度梯度作用下，采用多组元合金的组合扩散系数来确定异种接头的界面扩散系数，并以奥氏体钢/铁素体钢连接为例，模拟得出随着表面粗糙度降低，表面源扩散与界面源扩散主导孔洞演化与收缩，可使最终连接时间显著缩短。Wei等[20]面向不锈钢扩散连接，结合试验和仿真研究界面显微组织演化与界面孔洞闭合过程，制备不同预设表面粗糙度的接头，分析连接温度对界面组织与接头强度的影响，并建立不锈钢界面的孔洞闭合模型，阐明不同机制对孔洞闭合的贡献。通过模型计算得到，在950 ℃、6 MPa、60 min时，界面连接率达97.5%，体变形对孔洞闭合贡献率为87.723%，其中塑性变形12.517%、蠕变变形75.245%、扩散机制12.283%。

除了几何与动力学层面的改进，界面状态尤其是氧化层和界面层被逐步纳入该模型讨论的核心约束条件。传统模型默认界面为洁净接触，而界面氧化物往往会改变有效接触的建立路径与孔洞闭合效率，从而导致以理想界面为前提的预测出现偏差。Fu等[21]指出，多数扩散连接模型在处理孔洞闭合时并未考虑氧化层，以6061铝合金为研究对象，从工艺与后处理角度，讨论界面状态对闭合与强度形成的关键影响效果。该研究指出热等静压温度超过400 ℃时，界面孔隙完全塌陷并获得理想的结合特征与强度；低于400 ℃时孔隙闭合较困难且受多因素共同影响，这是因为结合判据主要由Mg扩散速率与Al_2O_3层厚度决定。因此，后续模型需要将氧化层等真实界面状态作为提高预测可靠性的重要条件（图4[21]）。

Wang等[22]提出将多相多组元相场模型用于扩散连接过程，能够同时描述孔洞与晶粒结构的演化，并用焊



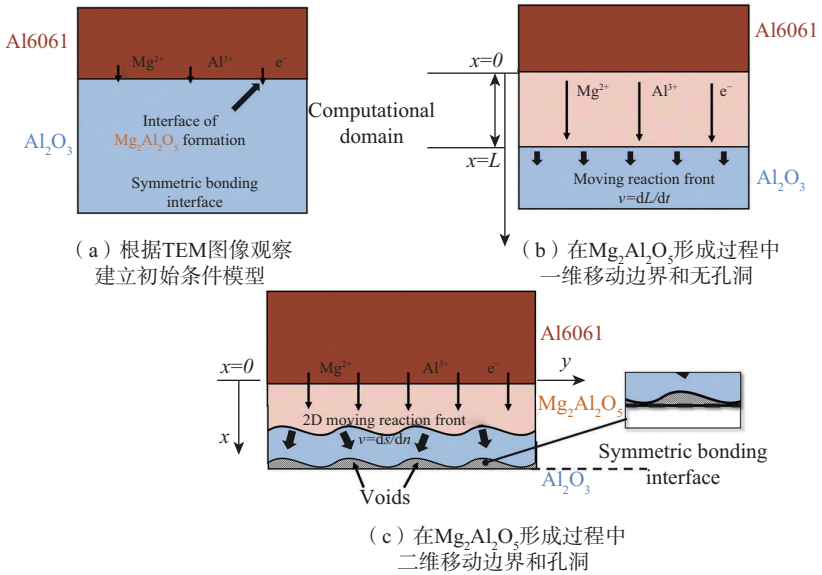
（a）在xz平面内示波图

（b）在yz平面内示波图

（c）长短波示意图

图3 铣床制备的界面微凸体的多尺度表面形貌特征与模型化描述[18]

Fig.3 Multiscale surface topography characteristics of interfacial asperities produced by milling and their modeling description [18]



（a）根据TEM图像观察建立初始条件模型

（b）在$Mg_2Al_2O_5$形成过程中一维移动边界和无孔洞

（c）在$Mg_2Al_2O_5$形成过程中二维移动边界和孔洞

图4 6061铝合金界面处扩散模型示意图[21]

Fig.4 Schematic of the interfacial diffusion model for 6061 aluminum alloy [21]

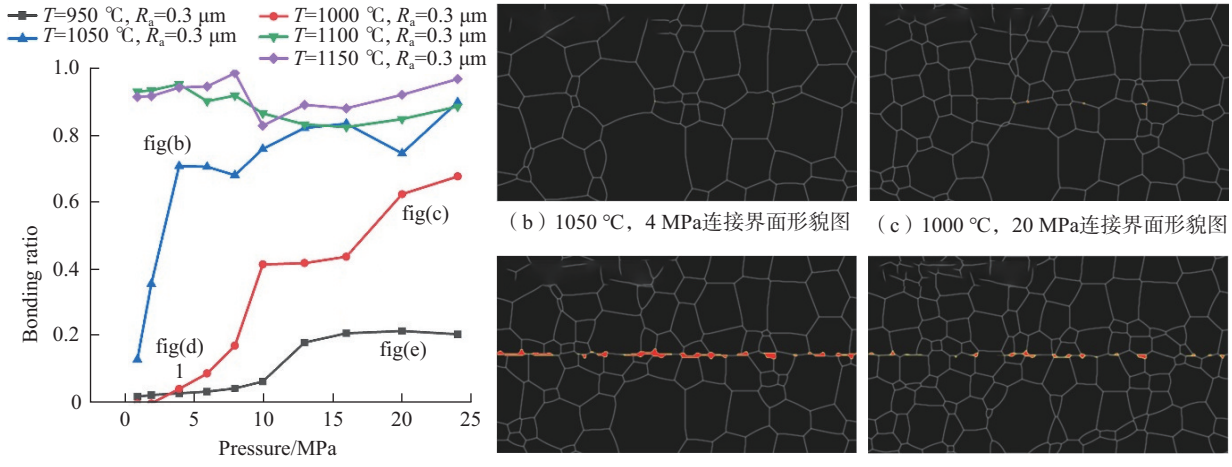
合率等指标量化连接质量。该模型模拟结果表明，在316H不锈钢扩散连接中，温度为影响焊合率的主导因素，在1050 ℃下，表面粗糙度>0.6 μm或施加压力<4 MPa时会导致结合质量差，而更高压力与更光滑表面可减小孔洞、加快孔洞收缩并提升结合完整性。该研究为“孔洞闭合–组织演化–性能形成”的建模提供了新的路径(图5[22])。

总体来看，界面接触与孔洞闭合模型以表面状态与高温变形行为为核心，系统描述了真实接触面积的建立与残余孔洞消除的物理过程。这类模型已从早期理想化微凸体描述发展到考虑真实表面形貌、多机制协同及过程性预测能力，为扩散连接中界面演化与冶金结合提供了必要的几何状态与力学边界条件。

1.2 原子扩散与界面消失模型

在界面实现充分几何接触后，扩散连接接头冶金结合的形成，本质上是原子扩散驱动下界面逐步演化的结果。界面演化机制由连接材料体系及原子扩散形式的共同影响。对于同质材料扩散连接，由于界面两侧化学成分和晶体结构基本一致，其界面演化主要体现为同种原子的自扩散、界面孔隙的闭合以及组织连续化过程；而对于异质材料扩散连接，界面两侧材料在成分、结构及扩散行为上的差异使界面演化过程更为复杂，除界面接触改善与孔洞闭合外，通常还涉及元素互扩散、界面反应层形成以及由组元扩散速率差异所导致的Kirkendall效应等行为[23–24]。从原子扩散形式来看，异质材料界面原子迁移主要包括间隙原子扩散和置换原子扩散两种基本方式，其中间隙原子扩散一般具有较快的迁移速率；而置换原子扩散则通常依赖空位辅助机制完成，其动力学过程相对缓慢[25]。因此，不同材料体系与原子扩散机制的耦合作用使扩散连接界面演化过程更加复杂，也对相关理论模型的构建与修正提出了更高要求。

在此基础上，早期研究将连接界面视为连续介质中的平面界面，以Fick扩散定律为理论基础，建立界面扩散层厚度与时间之间的定量关系，是原子扩散模型中最基本也是应用最广泛的理论基础[26–28]。Darken理论将化学势梯度与原子通量联系起来，并被广泛用于界面成分演化的定量分析[29]。近年来，研究者开始考虑界面扩散和晶界扩散等扩散通道，避免仅用体扩散系数带来的速率低估。Long等[30]以Mg/Al扩散连接为例，围绕界面孔洞的演化与消除机制，指出孔洞形貌与消失行为和界面附近的扩散通道密切相关，分析不同主导工艺参数下的扩散控制机制，支持了快速扩散通道主导局部界面演化速率的观点。Wang等[31]指出迁移晶界不会改变激活滑移系，但会抑制孔洞周围的晶界–多滑移相互作用，从而缓解应力集中，为耦合考虑晶界相关扩散与界面演化提供了更直接的物理依据。另一方面，部分研究将界面能与界面厚度演化关系引入模型，从而把传统浓度场扩散方程与界面结构演化更紧密地衔接起来。Kovacevic等[32]以ZrC/Ti为例，指出界面能对扩散具有明确的热力学驱动力贡献，并进一步发展了弥散界面相场描述，将界面能与局部成分耦合，从而能够在连续界面条件下模拟界面随扩散过程发生的演化过程，对临界厚度进行估算，并与试验结果达到良好一致。Hosseinabadi[33]同样采用弥散界面相场研究反应和互扩散主导的界面形成过程，通过耦合相场变量与浓度场，可描述沿氧化铝/反应层界面的界面反应、相变与相演化，并通过在相近连接条件下的定向扩散连接试验数据进行评估与验证(图6[33])。因此，这类改进不仅提升



（a）粗糙度R_a=0.3 μm的焊合率折线图　（b）1050 ℃，4 MPa连接界面形貌图　（c）1000 ℃，20 MPa连接界面形貌图　（d）1000 ℃，4 MPa连接界面形貌图　（e）950 ℃，20 MPa连接界面形貌图

图5 多相多组元相场模型对扩散连接过程中孔洞闭合与晶粒组织同步演化的描述[22]

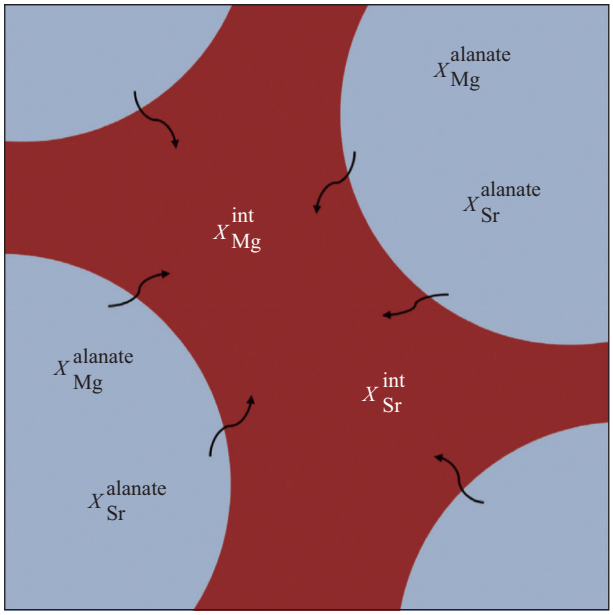
Fig.5 Description of the concurrent evolution of void closure and grain microstructure during diffusion bonding using a multiphase multicomponent phase-field model[22]

了原子扩散模型对界面成分连续性与反应层生长的预测能力，也为后续讨论界面消失判据与结构连续性的形成奠定基础。

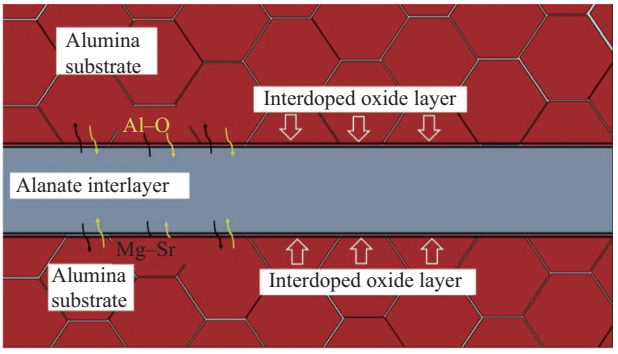
在原子扩散模型中，扩散达到何种程度才能认为连接界面消失是需要明确的问题。早期界面消失判据基于成分连续性假设，该假设在多晶或异种材料体系中存在局限。后续又将晶体结构连续性与界面能状态纳入判定标准，在此基础上，界面结构演化模型将界面视为具有有限厚度的过渡区，并耦合了界面厚度、界面能与原子扩散过程，这类模型使界面消失从突变判定转化为可定量描述的连续过程，为扩散连接中冶金结合形成机理提供了更具体表述[29, 31]。

上述原子扩散与界面消失模型普遍建立在界面已实现充分几何接触的前提下。然而，在实际扩散连接过程中，受表面粗糙度、界面残余孔洞、氧化物及表面污染等因素影响，连接界面往往呈现非理想接触状态，使原子扩散路径表现出明显的非均匀性。在这种情况下，界面消失过程不再仅由扩散动力学控制，而与界面接触状态和扩散通道的有效性密切相关[34]。Chang 等[19]构建了一个考虑真实界面形貌的孔洞演化动力学模型，量化了表面粗糙度对扩散路径的影响，并指出真实接触面积和有效扩散通道决定了扩散速率，该研究建议，为获得高质量接头，将更光滑的结合表面布置在抗蠕变能力更强的母材一侧，以促进孔洞闭合并缩短扩散连接时间。Wei 等[35]讨论了扩散连接中界面实际接触面积如何随表面粗糙度变化，通过开展奥氏体不锈钢扩散连接试验，建立由变形机制产生的界面结合率δ与轴向变形速率ε的解析方程，并给出孔洞闭合中变形机制与扩散机制的规律，并表明，当表面粗糙度为 0.045 μm 且温度≥750 °C时，结合率可>95%。另一方面，针对异种材料体系，界面反应层的形成、Kirkendall 效应及界面孔洞的演化往往相互耦合，使界面在局部区域可能经历“扩散–反应–再分隔”的复杂演化路径，从而进一步增加了界面消失判定的复杂性。Xie 等[36]针对 Cu–Zn 二元界面利用原位 TEM 技术研究了界面原子互扩散、金属间化合物生长过程及 Kirkendall 孔洞在热扩散过程中的演化，并分析了界面对金属间化合物互扩散速率与孔洞形成的影响。在 200 °C 时，Zn 原子快速向 Cu 扩散并在热扩散初期形成 β 相，随温度升高，Cu 原子主导金属间化合物形成过程中的扩散并对界面结构产生复杂影响，这为复杂演化路径提供了试验佐证。

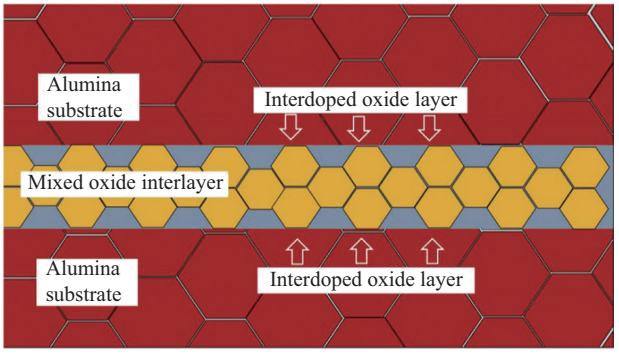
原子扩散模型的优势在于假设给出界面成分均匀化与反应层生长的定量关系，因而更适用于界面已实现充分几何接触、扩散通道连续且界面洁净的情形。但实际连接界面受粗糙度、残余孔洞、氧化物及污染等影响呈现非理想接触，尤其是氧化物等界面层会改变有效接触的建立路



（a）包含界面处(X^{int}_{Mg-Sr})和铝酸盐层($X^{Alanate}_{Mg-Sr}$)处摩尔浓度的扩散路径示意图



（b）浓度场下混合氧化物层的形成



（c）浓度场下混合氧化物层的形成

图6　氧化铝/反应层界面连接过程的扩散界面现象[33]

Fig.6　Diffusion-interfacial phenomena during bonding at the alumina/reaction-layer interface[33]

径，与理想界面为前提的扩散预测产生偏差。

1.3 多机制协同与主导机制迁移

扩散连接并非由单一机理贯穿始终，而是一个由界面几何连续化逐步过渡到冶金连续化的多物理过程。在这一过程中，界面处的主导机制会随温度、载荷与保温时间的变化发生迁移。早期阶段以界面微凸体变形与孔洞快速收缩为主，随后在较低应力与高温长时间条件下转为蠕变控制的闭合，最终在界面趋于致密后，原子扩散与界面结构演化对界面消失和成分与结构连续性的形成起决定作用[37–38]。Hamilton[12]对钛合金扩散连接过程的阶段划分与界面变形–扩散与再结晶–晶粒长大并行演化的认识，实质上是已明确了扩散连接的多机制协同属性，在不同阶段的贡献并不相同。

尽管现有多机制协同与主导机制迁移模型已能够从定性或半定量层面解释扩散连接过程中不同阶段的主导机理差异，但其理论描述仍存在若干根本性局限，限制了模型在复杂界面条件与跨材料体系中的普适性与预测能力。(1)多数模型仍以阶段划分或速率比较的方式处理机制迁移问题，这是假设各机制在空间与时间上相互独立、且界面状态在阶段内近似不变。然而实际扩散连接界面往往经历显著的几何重构与应力再分配，使不同机制在同一阶段内呈现高度耦合的并行作用[18]。(2)现有理论模型普遍采用静态或预设的界面几何参数来描述多机制协同。然而，这些几何参数正是多机制协同的结果，其演化过程反过来又会改变应力分布和扩散通道连通性，这也是导致不同模型对同一工艺区间得出差异预测的重要原因之一[14,19]。(3)在异种材料及多层结构扩散连接中，主导机制迁移往往受到成分不对称扩散、界面反应层生成以及Kirkendall效应的显著影响，而现有多机制模型多基于对称或近似对称材料体系建立[19,36]。基于上述局限，近年来的理论发展趋势逐步指向更具状态依赖性的多机制耦合描述。

2 扩散连接数值模拟

上述理论模型从机理层面揭示了扩散连接过程中界面接触、孔洞演化、原子扩散与界面消失之间的内在关联。然而，在实际扩散连接过程中，界面形貌、应力分布及扩散行为均呈现显著的非均匀性，单纯依赖解析模型难以实现对复杂结构和工艺条件的定量预测。因此，有必要在理论模型的物理约束下，引入数值模拟方法，对多机制协同作用下的界面演化过程进行可计算化描述。

2.1 数值模拟的物理基础与状态变量选取

在上述理论模型的物理约束下，数值模拟的任务在于将界面接触、孔洞闭合、原子扩散及界面消失等机理过程，转化为可求解的场变量及其演化关系，从而实现对扩散连接过程中界面状态演变的定量描述。因此，数值模拟的物理基础并不来源于经验假设，而是建立在前文所介绍的多机制协同作用模型之上，其建模对象和变量选取需与相应机理过程保持对应关系[15–16,39]。数值模拟重点关注的是界面邻域的局部演化行为，包括界面接触状态的形成与扩展，孔洞结构随加载和保温过程的变化，以及由此诱导的原子迁移行为和界面演化过程。因此，在数值模拟中需选取能够反映关键机理且具备可计算性的状态变量。界面接触状态以真实接触面积比例、未接触面积比例或孔洞体积分数等参数表征；界面变形及孔洞闭合过程可通过界面邻域的应力–应变状态以及随时间的演化来描述；原子扩散行为则可采用扩散通量、浓度场或等效扩散系数为主要变量；而界面消失与冶金连续性的形成，可通过扩散层厚度、成分或结构连续性指标以及未结合区域比例等参数进行定量表述[40–41]。

上述状态变量在扩散连接过程中并非相互独立，而是呈现出明确的依赖关系。因此，需在统一计算框架内对多类状态变量的协同演化进行描述，以支撑多机制耦合数值模型的构建。

2.2 界面接触与孔洞闭合过程的数值描述

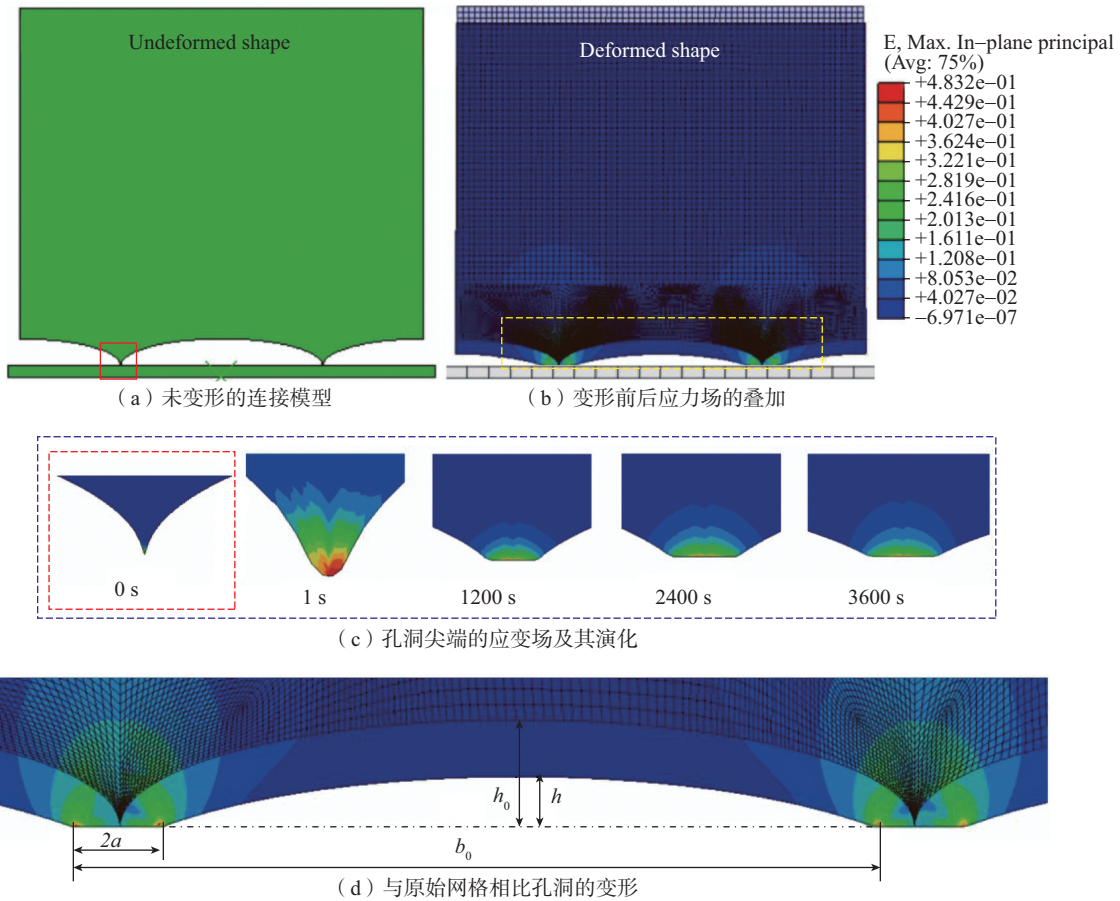
界面接触与孔洞闭合的数值模拟首先用来处理真实表面几何与应力场的空间非均匀性，即在界面微凸体和孔洞尺度上，计算真实接触的形成、孔洞颈部应力集中与材料向孔洞内的流动，早期具有代表性的工作是Hill等[16]在固相扩散连接几何表征与孔洞形貌合理化的基础上，推动此类问题从几何理想化向可计算几何进行过渡，为后续将界面孔洞形貌纳入数值求解奠定了重要基础。

随着计算力与接触算法的发展，界面接触与孔洞闭合数值仿真开始显式引入真实表面形貌参数，并在有限元框架下评估不同表面状态对闭合动力学与焊合率的影响规律。Wang等[42]研究了表面微凸体几何参数，主要为峰高H、波长W及长宽比H/W对扩散连接过程的影响，并用数值分析建立对车削加工表面的预测。结果表明，W与H对扩散连接接头性能有显著影响，当H恒定时，增大H/W可加速孔表面与连接界面的原子扩散，促进孔洞收缩并增加结合面积，从而提升接头强度。该工作促使后续数值模拟将表面粗糙度和微凸体统计作为初始条件。近年来，相关工作的进展主要体现在两个方面：(1)将孔洞闭合过程视为随时间推进的界面局部变形问题，通过动态计算获得孔洞形貌–应力应变场–焊合率的同步演化，从而避免仅用均匀化参数表征界面状态。Wu等[43]基于实际待连接表面信息并考虑有限时间内的扩散距离效应，提出新的扩散连接

理论模型，并通过模拟分析不同作用机制、连接参数与显微组织对连接行为的影响。(2)面向工程结构与工艺窗口预测，将界面接触与孔洞闭合的数值仿真与表面形貌表征更紧密耦合，Saranam 等[44]以 316 不锈钢为对象，针对磨削和冷轧两类不同表面形貌与化学机械抛光表面进行扩散连接，并用有限元分析研究早期塑性变形与接触建立过程，结果表明，传统扩散连接模型对磨削与冷轧样品的结合面积比例存在显著高估，且对磨削表面的高估更严重。在与磨削表面近似相同粗糙度条件下，冷轧表面的接触面积高约 50%，且其应变水平约为磨削表面的四分之一，这使真实表面状态驱动的数值预测成为可操作路径。Peng 等[45]建立扩散连接中孔洞闭合的解析模型，将基于变形机制的有限元分析与基于扩散机制的数值分析进行耦合。把界面早期接触阶段的局部应力集中与孔洞闭合速率作为可直接提取的数值指标，通过有限元计算获得界面微凸体接触与孔洞颈部区域的应力演化特征，并以此服务于连接过程的时间尺度预测与窗口评估(图 7[45])。

2.3 原子扩散与界面消失过程的数值表征

原子扩散与界面消失的数值表征经历从一维平均化浓度场到多组分、可与界面形貌和孔洞演化并行求解的演进过程。近年来，扩散求解不再停留在常系数 Fick 方程的拟合，而是将扩散系数的成分和温度依赖性作为数值求解的一部分引入，直接预测在复杂温度变化与边界条件下扩散层厚度与成分梯度。Chesser 等[46]采用原子尺度计算模拟研究 Al–Si 相界面的原子结构、热稳定性与扩散行为，并分析不同取向关系与界面状态对扩散的影响，与已有外延试验观察一致。Sun 等[47]以 X65/316L 双金属为对象，通过双金属热压缩试验研究宏观变形、组织演化与元素扩散。提出带可变扩散系数的元素浓度扩散模型，用于确定冶金结合过渡区的元素浓度分布，同时建立包覆管热挤压过程的有限元模型，并将所提扩散模型用于分析冶金结合过渡区内元素扩散行为，为后续将扩散场与其他场变量耦合奠定了基础。与此同时，该过程的数值表征也呈现出显著的多尺度趋势，Luu 等[48]以 Al–Cu 固相扩散连接为对象，采用分子动力学研究原子尺度变形机制与界面金属间化合物形成之间的关系，并引入更高精度的势函数体系，揭示了界面纳秒尺度的扩散与结构演化特征，GP 区在纳秒尺度于 Cu/Al 单晶界面出现。



(a) 未变形的连接模型　(b) 变形前后应力场的叠加

(c) 孔洞尖端的应变场及其演化

(d) 与原始网格相比孔洞的变形

图 7　孔洞闭合的有限元模拟结果[45]

Fig.7　Finite element simulation results of void closure[45]

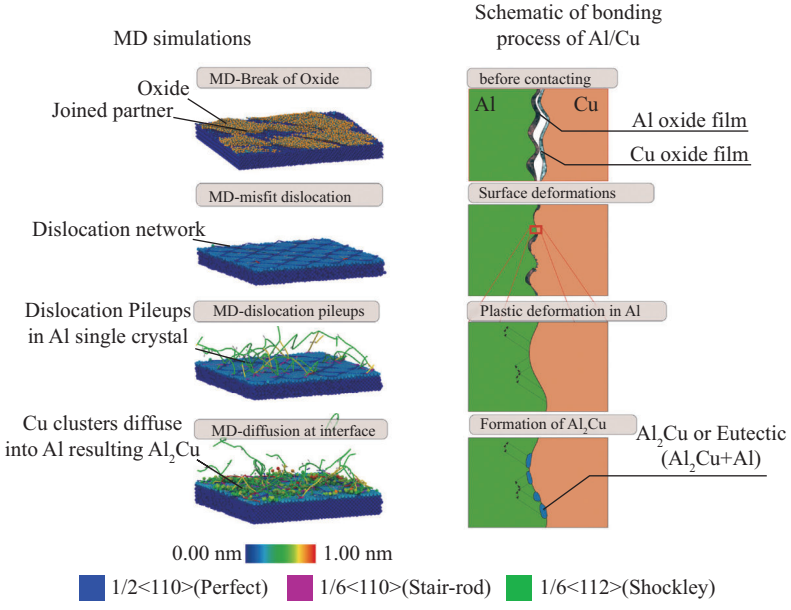
并指出在无氧化物条件下，Al_2Cu金属间化合物易于形成。该研究在原子层面直接观测与量化界面消失的早期过程，为上层模型中的有效扩散参数、界面反应和相生成处理提供了数值证据（图8[48]）。

2.4 多机制协同作用下界面演化的耦合数值框架

就耦合策略而言，现有研究大体形成了从顺序耦合向迭代耦合演进的脉络，初期常采用力学–扩散顺序耦合，即先用有限元接触或蠕变计算得到界面邻域的真实接触面积比例、孔洞体积分数及特征扩散距离，再将这些量映射为扩散边界条件或等效扩散参数以求解浓度场与扩散层生长，这种思路的优势在于可实现性强，且需要较低的计算成本。Peng等[45]采用了基于变形机制的有限元分析与基于扩散机制的数值分析，用界面局部应力集中与接触区域演化来驱动后续扩散相关的时间尺度预测，从而实现了多机制协同的预测流程，如图9所示。

耦合深化主要体现在两个方面，一方面，Sun等[47]提出的可变系数元素扩散模型把扩散问题从常系数推进为状态依赖，从而使扩散问题能够对工艺热循环历史、局部应变和扩散距离等因素做出更真实的响应；另一方面，将真实表面形貌驱动的接触演化与扩散通道连通性紧密绑定，使耦合的关键不再是简单传递一个平均接触面积，而是传递空间分布意义上的真实接触。Wu等[43]较早强调必须考虑实际表面信息与扩散距离对连接过程的影响，为后续把几何–应力–扩散耦合到同一计算闭环提供了方向。刘晨曦等[19]在考虑真实表面形貌差异的条件下讨论异种金属扩散连接的孔洞演化动力学，使接触状态–有效扩散通道之间的映射更具可检验性，也使耦合框架更接近工程界面的真实复杂性。

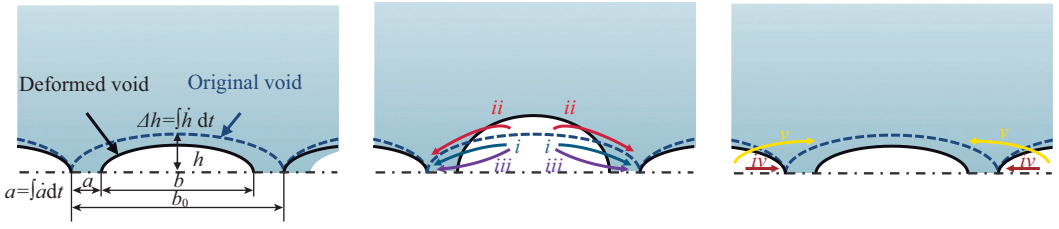
尽管上述耦合框架在近年取得了明显进展，但现阶段扩散连接数值仿真仍存在几类具有共性的瓶颈，限制耦合框架从机理可计算化走向工艺可预测化。(1)耦合计算对材料高温本构模型、界面接触参数、扩散动力学参数高度敏感，但这些参数往往具有显著的状态依赖性与材料批次差异，导致同一框架在跨材料、跨温度区间迁移时需要大量再标定，预测的精确性和稳定性不足；(2)真实界面状态例如氧化物、污染层等在多数耦合模型中仍被简化为理想接触或等效边界条件，而这类因素恰恰决定了有效扩散通道的连通性与界面消失的实际门槛，使之在工程体系中偏差过大；(3)多尺度特征跨度大，单一离散尺度难以兼顾效率与分辨率，细网格与界面跟踪会导致计算成本陡增，而粗网格又会消除接触和孔洞的关键特征；(4)耦合仿真的试验验证受限于指标不统一，试验只能获得连接后某一离散状态下的宏观力学性能以及终态截面组织表征，而仿真输出是连续场和演化过程，缺乏稳定的验证指标。



（a）线缺陷的形成及Cu原子的运动　　（b）连接过程示意图

图8 Cu–Al连接时界面处的分子动力学模拟[48]

Fig.8 Molecular dynamics simulation of the interfacial region during Cu–Al bonding



（a）体变形机制　　（b）界面源机制　　（c）表面源机制

图9 界面孔洞闭合过程中的物质转移机制与途径[45]

Fig.9 Material transport mechanisms and pathways during interfacial void closure[45]

3 理论与数值模型在扩散连接工艺预测中的应用

扩散连接工艺预测的核心目标是在给定材料体系与条件下，判断特定工艺参数组合是否能够实现可靠的冶金结合，其本质是界面状态演化的判定问题。Guo 等[39]在早期综述中指出，扩散连接过程应被视为界面几何与扩散动力学协同演化的结果，而非简单的热–力加载问题。在此背景下，理论模型与数值模拟的角色逐渐清晰，理论模型通过简化假设提供界面演化的物理判据与可行性边界，而数值模拟则在此基础上对界面状态随空间和时间的演化进行定量计算。二者结合使扩散连接工艺预测由经验外推转向基于界面状态判定的模型驱动路径，为工艺参数优化与反推提供了统一的建模视角。

在扩散连接的理论建模中，Hill 等[16]提出的模型采用简化的孔洞几何假设，通过类比烧结动力学中的机理，识别并量化了扩散连接过程中界面孔洞闭合的驱动力和速率控制机制，为评估工艺可行性提供了数学判据。Derby 等[17]构建的理论模型揭示了扩散、塑性流动与孔洞演化之间的耦合关系，强调了温度和压力对界面状态控制的重要性。这些理论模型提供的必要条件判据对于工艺参数初筛和工艺窗口的粗略估算至关重要。尽管理论模型能够快速限定温度–压力组合的可行区间，但其出发假设往往是界面状态均匀且宏观可平均化，这导致在复杂几何或非均匀应力场下的预测能力受限。因此，基于数值模拟的方法成为理解界面演化的核心手段。分子动力学和有限元方法已广泛用于研究界面原子扩散与宏观接触状态的耦合。Chen 等[49]采用分析动力学模拟研究了 Cu–Ag 扩散连接中原子级别的界面扩散行为，明确展示了温度和应力对界面扩散层厚度和原子渗透行为的影响规律，这类原子尺度模拟能够捕捉到界面原子迁移、粗糙度减小和初始接触演化等过程，弥补了理论模型对微观机制理解的不足（图 10）。Akif 等[50]面向 SS304/Inconel–718 异种扩散连接，建立综合模型，将有限元分析的变形机制与数值扩散框架耦合，以同时表征界面处的力学行为与原子尺度扩散，并进一步引入机器学习模型在更宽压力–温度范围内预测结合率。结果表明，结合时间–结合率关系呈指数趋势，孔洞尺寸预测与试验对比误差< 0.1 μm。元素扩散预测经试验验证，平均误差约 15%。

理论模型与数值模拟的协同优势体现在两个层面，一方面，理论模型为数值计算设定合理的参数边界并提供物理约束；另一方面，数值模拟在该边界内精细刻画了界面状态空间，进而形成可用于工程决策的映射关系。这种协同框架使得传统以经验驱动的工艺设计逐渐向模型驱动、预测性强的工艺优化转变，尤其在多层构件、异种材料连接及复杂几何部件制造中展现出显著优势。

随着扩散连接技术由简单板–板接头向多层构件、中空结构及异种材料整体制造发展，工艺预测所面临的复杂性显著提升。在复杂结构中，界面所承受的压力分布、温度梯度及变形路径往往呈现明显的非均匀性，使得传统理论模型难以直接适用。因此，工艺预测的重点逐渐由焊合率转向连接界面在构件上的状态分布。在航空航天和高性能结构制造领域，扩散连接常与超塑性成形等工艺耦合使用，其工艺窗口不仅受材料性能限制，还受到复杂几何约束和成形路径的影响。从工程应用角度看，扩散连接主要用于制造高比刚度、轻量化和高可靠性的一体化构件，典型应用可归纳为发动机空心叶片、飞机夹层承力结构、复杂薄壁空腔件、高温耐热结构件以及紧凑式热管理系统等，如表 1 所示。

Du 等[9]在对钛合金扩散连接/超塑成形构件的研究中指出，局部连接失效往往源于界面接触不足或扩散滞后区域，而非整体工艺参数选择不当（图 11）。这类问题难以通过经验试验提前识别，而数值模拟可在构件设计阶段对潜在薄弱区域进行预测。在多层或异种材料扩散连接中，界面状态的空间差异进一步放大。

Shirzadi 等[51]在对异种金属扩散连接的研究中强调，界面孔洞和反应层的空间分布对接头可靠性具有决定性影响，而数值模拟是实现此类界面状态预测的重要工具。近年来，扩散连接工艺预测模型的工程化趋势愈发明显，Liu 等[1]在大型构件焊接模拟综述中指出，未来制造过程建模的重要方向之一是实现局部机理模型与构件级工艺模拟的有机结合。

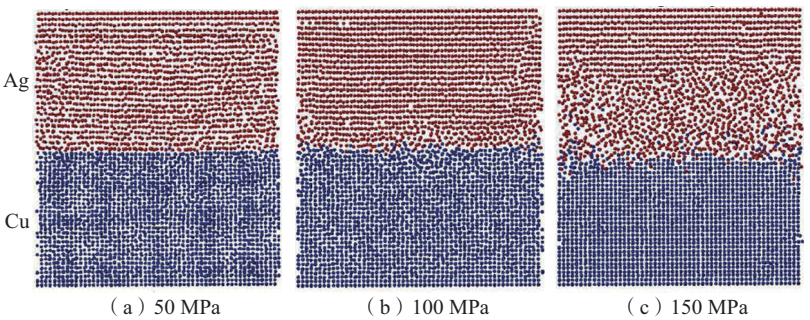


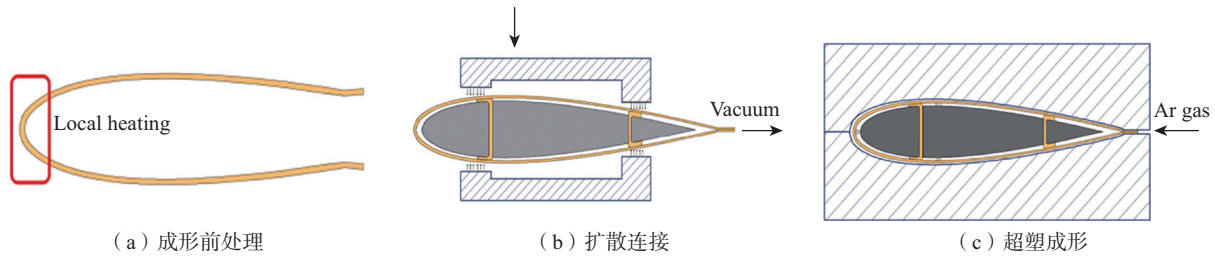
图 10　Cu/Ag 扩散连接界面在不同外加应力下的截面构型图（蓝色为 Cu 原子；红色为 Ag 原子）[49]

Fig.10　Snapshots of the cross-section of the Cu/Ag diffusion-bonded interface under different applied stresses (blue atoms represent Cu and red atoms represent Ag)[49]

表1 扩散连接的典型工程应用

Table 1 Typical engineering applications of diffusion bonding

应用类别	典型构件/部位	扩散连接的主要作用	国内案例	国外案例
航空发动机叶片	空心宽弦风扇叶片、空心叶片/叶栅	轻量化、提高比刚度、减少零件数与机械连接	CJ–1000A钛合金宽弦空心风扇叶片	英国Rolls-Royce风扇叶片
飞机承力夹层结构	机翼壁板、前翼壁板、夹层承力板	提高承载效率、减轻结构质量、实现整体化制造	运–20运输机机身壁板	美国NASA机翼壁板
复杂薄壁空腔与热结构件	前翼/鸭翼、龙骨、舵面、导管/喷管、热屏蔽件、高温壁板	适于复杂外形与内腔一体化制造，并满足高温服役要求	航发MGH956多孔层板浮动壁火焰筒	Eurofighter Typhoon前翼/鸭翼
紧凑式热管理系统	微通道换热器、紧凑式换热器	提高换热效率，同时兼顾强度、密封性和紧凑化	中核集团“超碳一号”换热芯体	美国Honeywell微通道换热器



（a）成形前处理 （b）扩散连接 （c）超塑成形

图11 扩散连接/超塑成形示意图[9]

Fig.11 Schematic illustration of diffusion bonding/superplastic forming[9]

在此基础上，若要使工艺预测真正服务于工程应用，还需建立与预测结果相匹配的质量评价与缺陷预测调控方法。现有研究表明，扩散连接质量的判定已不局限于焊合率这单一指标，而应结合界面孔洞残余、反应层厚度、组织连续性以及接头力学性能等多维表征参数进行评价[52]。与此同时，工艺预测目标也应由是否实现100%焊合率进一步拓展为对未焊合区、残余孔洞、界面反应层异常增厚及局部连接失效等典型缺陷的识别、判断与调控[53]。基于理论模型与数值模拟对界面质量的预测结果，可进一步反向优化温度、压力、保温时间及界面处理方式等关键工艺参数，从而形成“工艺参数–界面演化–质量评价–缺陷调控”的闭环分析框架。

总体而言，在复杂结构制造和工程应用背景下，扩散连接工艺预测已不再局限于单一界面结合的判定，而是逐步演变为一个涉及界面状态分布、质量评价、缺陷识别、工艺路径设计及结构完整性保障的系统问题[54–55]。理论模型与数值模拟的协同应用，使得在设计阶段识别工艺风险、优化参数组合并调控缺陷成为可能，为扩散连接技术在复杂构件整体制造中的应用奠定了基础。

为进一步明确扩散连接不同理论模型与数值仿真方法的研究侧重点、适用范围及优缺点，表2对全文涉及的主要技术路线进行了横向归纳与比较。

由表2可见，扩散连接研究已逐步形成由界面接触、孔洞闭合和原子扩散等理论模型，到连续介质、原子尺度及多尺度耦合仿真，再到工艺预测与智能化优化的完整研究体系。

4 结论与展望

4.1 结论

扩散连接作为一种典型的固相连接技术，其本质并非单一扩散或变形过程，而是一个由界面几何连续化向冶金连续化演进的多机制协同过程。本文围绕扩散连接理论模型与数值模拟方法的演进脉络，系统梳理了界面接触与孔洞闭合、原子扩散与界面消失以及多机制协同与主导机制迁移等关键问题，并在此基础上讨论了理论与数值模型在工艺预测中的角色与边界。理论模型为扩散连接提供了必要的物理约束和工艺可行性判据，而数值模拟则在此基础上实现了界面状态演化的定量描述。二者的协同应用，使扩散连接工艺设计逐步向基于界面状态判定的模型演进，尤其在多层构件、复杂结构和异种材料整体制造中展现出显著潜力。

4.2 展望

尽管扩散连接理论与数值模拟在近年来取得了显著进展，但要实现从机理可解释向工艺可预测的跨越，今后可重点围绕以下6个方向展开研究。(1)理论模型发展重点应由多机制协同判定转向以界面状态变量的连续描述，从而提升模型的普适性；(2)表面粗糙度、氧化物、污染层及界

表2 扩散连接理论模型与数值仿真方法对比

Table 2 Comparison of theoretical models and numerical simulation methods for diffusion bonding

类型		主要内容	适用范围	优势	局限性
理论模型	界面接触模型[12-13]	初始接触与几何连续化	连接初始阶段；对粗糙度敏感	物理图像清晰；便于分析接触的建立条件	难表征真实多尺度表面；后续扩散与组织演化考虑不足
	孔洞闭合模型[18,22]	孔洞收缩、闭合及焊合率演化	中高温扩散连接全过程	可建立温度、压力、时间与焊合率关系	对材料本构参数敏感；真实界面影响考虑不足
	原子扩散模型[23-24]	元素扩散、扩散层生长及成分均匀化	已实现较充分接触的同质及异质界面	理论成熟；冶金结合分析基础	多基于理想界面假设；对界面孔洞和反应层耦合考虑不足
	真实界面修正模型[35]	引入界面粗糙度、氧化物、污染层及反应层等真实因素	轻合金、异种材料及实际工程界面	贴近真实工况；有助于提高预测可靠性	参数获取困难；试验标定难度较高
数值仿真	连续介质仿真[44-45]	应力应变分布、孔洞演化及扩散层生长模拟	复杂接头及构件级工艺分析	工程适用性强；便于与工艺参数结合	微观机制表征能力有限；依赖材料参数
	原子尺度仿真[46-47]	原子扩散、界面迁移及连接早期演化机制揭示	纳米尺度与短时机理研究	可直接观察原子重排和局部反应	时空尺度受限；难直接用于宏观工艺预测
	多尺度与耦合仿真[19,43]	多机制协同演化及尺度间信息传递	复杂构件、异种材料及组织演化分析	有望兼顾机理揭示与工程预测能力	建模复杂；参数传递与验证难度大
	工艺预测与智能化仿真[50]	工艺参数与界面状态、缺陷和性能映射	工程优化及智能制造场景	预测效率高；可用于质量评价与缺陷预警	依赖高质量大数据；可解释性仍需增强

面反应层等真实界面特征的参数化建模，并建立试验表征与模型参数之间的映射关系；(3)聚焦尺度间信息的有效传递，实现多尺度协同建模；(4)建立界面状态评价指标体系；(5)模型应与构件级工艺模拟相结合，使扩散连接预测从参数优化升级为工艺路径与结构协同设计；(6)加强智能制造技术在扩散连接工艺中的融合应用，结合数据驱动方法、机器学习、数字孪生以及过程在线监测技术，构建集工艺参数优化、连接质量预测、缺陷预警与自适应调控于一体的智能化工艺设计方法。

总体而言，扩散连接理论与数值模拟正处于由机理认知向工程预测转型的关键阶段。随着先进试验表征手段、计算能力和多尺度建模方法以及智能制造技术的不断发展，扩散连接研究将进一步向数字化、智能化和集成化方向演进。有望从经验驱动工艺，演化为具有高度预测能力的界面工程技术，为复杂轻量化结构和高性能构件的一体化制造提供坚实的理论与方法支撑。

参 考 文 献

[1] Liu S, Wu Z Q, Zhou W H, et al. A review of welding simulation methods for large components[J]. Progress in Natural Science: Materials International, 2023, 33(5): 551–568.

[2] Habba M I A, Ahmed M M Z. Friction stir welding-based technologies: A comprehensive review from the sustainable manufacturing perspectives[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2025, 38: 1–29.

[3] Gao Y K, Hao K D, Xu L Y, et al. Microstructure homogeneity and mechanical properties of laser-arc hybrid welded AZ31B magnesium alloy[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(5): 1986–1995.

[4] Ravichandran B, Balasubramanian M. A comprehensive review on sustainability evaluation of joining methods for engineering materials[J]. Materials Today Sustainability, 2025, 31: 101151.

[5] Larsen L, Endrass M, Jarka S, et al. Exploring ultrasonic and resistance welding for thermoplastic composite structures: Process development and application potential[J]. Composites Part B: Engineering, 2025, 289: 111927.

[6] Chandra D, Nukman Y, Azka M A, et al. Review on integral stiffened panel of aircraft fuselage structure[J]. Defence Technology, 2025, 46: 1–11.

[7] Wang H Y, Hu Z S, Dong Y, et al. Research on the hybrid joining process and failure mode of laser welding and riveting on QP980 steel/CFRP[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2023, 90: 310–320.

[8] Khedr M, Hamada A, Järvenpää A, et al. Review on the solid-state welding of steels: Diffusion bonding and friction stir welding processes[J]. Metals, 2023, 13(1): 54.

[9] Du Z H, Wang C X, Liu Q, et al. The superplastic forming/diffusion bonding of TA7 titanium alloy for manufacturing hollow structure with stiffeners[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2022, 73: 385–394.

[10] Peng Y, Li J L, Li Z X, et al. Interfacial voids and microstructure evolution, bonding behavior and deformation mechanism of TC4 diffusion bonded joints[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2022, 81: 837–851.

[11] Li T L, Lei Y W, Chen L Z, et al. Advances in mechanism and application of diffusion bonding of titanium alloys[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2025, 337: 118736.

[12] Hamilton C H. Pressure requirements for diffusion bonding titanium[M]//Titanium Science and Technology. Boston, Springer US, 1973: 625–648.

[13] Garmong G, Paton N E, Argon A S. Attainment of full interfacial contact during diffusion bonding[J]. Metallurgical Transactions A, 1975, 6(7): 1269–1279.

[14] Peng Y, Li J L, Li Z X, et al. Modeling of bonding pressure based on the plastic deformation mechanism of interfacial voids closure in solid-state diffusion bonding[J]. Materials & Design, 2024, 245: 113239.

[15] Derby B, Wallach E R. Theoretical model for diffusion bonding[J]. Metal Science, 1982, 16(1): 49–56.

[16] Hill A, Wallach E R. Modelling solid-state diffusion bonding[J]. Acta Metallurgica, 1989, 37(9): 2425–2437.

[17] Derby B, Wallach E R. Diffusion bonding: Development of theoretical model[J]. Metal Science, 1984, 18(9): 427–431.

[18] Wu H P, Yang W B, Peng H L, et al. Diffusion bonding criterion based on real surface asperities: Modeling and validation[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2020, 57: 477–487.

[19] Chang R J, Guo Q Y, Ma Z Q, et al. Kinetics of voids evolution during diffusion bonding of dissimilar metals on consideration of the realistic surface morphology: Modeling and experiments[J]. Acta Materialia, 2024, 276: 120121.

[20] Wei Y N, Zhang S Y, Li Q N, et al. Study on the microstructure evolution and the interfacial void closure mechanism of the stainless steel diffusion bonding joints[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2025, 1041: 183780.

[21] Fu Y C, Mason C J T, Kalsar R, et al. Optimizing post-processing procedures to enhance bond quality of additively manufactured aluminum alloy 6061 using multiscale modeling[J]. npj Advanced Manufacturing, 2025, 2: 27.

[22] Wang R, Wang P, Bhatt S, et al. Phase-field modeling of diffusion bonding in 316H stainless steel: Impact of processing conditions on grain morphology and bonding quality[J]. Materials Science and Engineering: A, 2025, 945: 149051.

[23] Zhang M C, Ren D C, Xu Q S, et al. Influence of diffusion bonding temperature on the interfacial evolution behaviors of GH4169 joints produced by solid-state diffusion bonding additive manufacturing[J]. Materials Letters, 2025, 382: 137851.

[24] Feng W, Zhang J, Guo H C, et al. Dissimilar low-temperature diffusion bonding of copper and titanium using a Zn interlayer: Interfacial microstructure and mechanical properties[J]. Intermetallics, 2024, 173: 108437.

[25] Futazuka T, Ishikawa R, Yokoi T, et al. Direct observation of substitutional and interstitial dopant diffusion in oxide grain boundary[J]. Nature Communications, 2025, 16: 9043.

[26] Sridhar S. A commentary on "diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems," L. S. Darken: Trans. AIME, 1948, vol. 175, p. 184ff[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2010, 41(3): 543–562.

[27] Shewmon P. Diffusion in Solids[M]. Cham: Springer International Publishing, 2016.

[28] Fick A. Ueber diffusion[J]. Annalen der Physik, 1855, 170(1): 59–86.

[29] Zhao H L, Song M, Ni S, et al. Atomic-scale understanding of stress-induced phase transformation in cold-rolled Hf[J]. Acta Materialia, 2017, 131: 271–279.

[30] Long L P, Liu W S, Ma Y Z, et al. Evolution of voids in Mg/Al diffusion bonding process[J]. High Temperature Materials and Processes, 2017, 36(10): 985–992.

[31] Wang W, Balint D S, Shirzadi A A, et al. Imparted benefits on mechanical properties by achieving grain boundary migration across voids[J]. Acta Materialia, 2023, 256: 119103.

[32] Kovacevic S, Pan R, Sekulic D P, et al. Interfacial energy as the driving force for diffusion bonding of ceramics[J]. Acta Materialia, 2020, 186: 405–414.

[33] Hosseinabadi N. The diffuse interface phase-field model for *in situ* interlayer phase formations in low-temperature reaction bonding of alumina laminates—A theoretical and experimental comparison[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2022, 105(7): 4639–4654.

[34] Li L, Sun L X, Li M Q. Diffusion bonding of dissimilar titanium alloys via surface nanocrystallization treatment[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2022, 17: 1274–1288.

[35] Wei Y N, Zhang S Y, Jia L, et al. Study on the influence of surface roughness and temperature on the interface void closure and microstructure evolution of stainless steel diffusion bonding joints[J]. Metals, 2024, 14 (7): 812.

[36] Xie L L, Lu H, Jiao Y L, et al. Interfacial diffusion and Kirkendall voids evolution in the Copper-Zinc alloy binary interface revealed by in situ transmission electron microscopy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 968: 172018.

[37] Li S W, Li Z X, Liu P K, et al. Microstructural evolution and mechanical response of micro-deformation diffusion bonding Ti – 6Al – 4V with designed interface morphology[J]. Materials Characterization, 2024, 212: 114015.

[38] Xu R W, Dong P P, Tang L, et al. Interface evolution behaviors and shear strength of vacuum diffusion bonded 45 steel/additive manufactured 316L stainless steel joints[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 30: 8553–8562.

[39] Guo Z X, Ridley N. Modelling of diffusion bonding of metals[J]. Materials Science and Technology, 1987, 3(11): 945–953.

[40] Orhan N, Aksoy M, Eroglu M. A new model for diffusion bonding and its application to duplex alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 1999, 271(1–2): 458–468.

[41] Zhang C, Li H, Li M Q. Detailed evolution mechanism of interfacial void morphology in diffusion bonding[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2016, 32(3):

259–264.

[42] Wang A R, Ohashi O, Ueno K. Effect of surface asperity on diffusion bonding[J]. Materials Transactions, 2006, 47 (1): 179–184.

[43] Wu G Q, Li Z F, Luo G X, et al. Dynamic simulation of solid-state diffusion bonding[J]. Materials Science and Engineering: A, 2007, 452–453: 529–535.

[44] Saranam V R, Mullany B, Tabei A, et al. Surface topographical effects in the diffusion bonding of 316 stainless steel[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2021, 296: 117173.

[45] Peng Y, Li Z X, Guo W, et al. Modeling of interfacial void closure and prediction of bonding time in solid-state diffusion bonding[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2024, 324: 118267.

[46] Chesser I, Koju R K, Vellore A, et al. Atomistic modeling of metal-nonmetal interphase boundary diffusion[J]. Acta Materialia, 2023, 257: 119172.

[47] Sun C Y, Cong Y P, Zhang Q D, et al. Element diffusion model with variable coefficient in bimetallic bonding process[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2018, 253: 99–108.

[48] Luu H T, Merkert N. Investigation of solid-state diffusion bonding of Al – Cu interfaces of metal joints using molecular dynamics simulations[J]. Results in Surfaces and Interfaces, 2025, 20: 100574.

[49] Chen S D, Soh A K, Ke F J. Molecular dynamics modeling of diffusion bonding[J]. Scripta Materialia, 2005, 52(11): 1135–1140.

[50] Akif M, Junaid M, Shehbaz T, et al. Investigating void closure and diffusion mechanism in diffusion bonding of SS – 304/ inconel−718 joints using finite element analysis and machine learning[J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2026, 35(8): 7583–7598.

[51] Shirzadi A A, Assadi H, Wallach E R. Interface evolution and bond strength when diffusion bonding materials with stable oxide films[J]. Surface and Interface Analysis, 2001, 31(7): 609–618.

[52] Zheng J B, Shu X D, Xu Y C, et al. Variable coefficient element diffusion model and microstructure evolution of Mg/Al bimetals during thermal bonding process[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2025, 1026: 180491.

[53] Ma Z, Shu X D, Xu H J, et al. Investigation and prediction of solid-state bonding quality of Al−0.5Mg−0.4Si alloy under different process parameters during hot compression bonding[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2025, 36: 3921–3935.

[54] Chandrappa K, Sumukha C S, Sankarsh B B, et al. Superplastic forming with diffusion bonding of titanium alloys[J]. Materials Today: Proceedings, 2020, 27: 2909–2913.

[55] Lee K S, Huh H. Simulation of superplastic forming/diffusion bonding with finite-element analysis using the convective coordinate system[J]. Journal of Materials Processing Technology, 1999, 89–90: 92–98.

Research Progress in Diffusion Bonding Theory and Numerical Simulation: From Interfacial Evolution Mechanisms to Process Prediction

ZHANG Bing, XU Dexi, LI Xifeng

(Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030, China)

[ABSTRACT] Diffusion bonding is a representative solid-state joining process featuring low defect susceptibility and high joint densification, and it enables integral fabrication of dissimilar materials and multilayer structures. Owing to these advantages, it has been widely applied in high-end equipment such as aerospace systems. The bonding quality is jointly governed by the establishment of true interfacial contact, void closure, atomic diffusion accompanied by interfacial disappearance, and compositional homogenization. This review summarizes theoretical models and numerical simulation approaches for diffusion bonding. Particular emphasis is placed on the physical implications and applicable ranges of different theoretical models. Recent progress in numerical methods, including finite element analysis, molecular dynamics, and phase-field modeling, for interfacial evolution and process prediction is also reviewed, and their synergistic roles are further discussed. Finally, the remaining challenges in describing realistic interfacial states, multiscale coupling, and prediction robustness are highlighted, and perspectives are provided on the transition of diffusion bonding research from mechanistic understanding to process prediction.

Keywords: Diffusion bonding; Theoretical models; Numerical simulation; Lightweighting; Integrated manufacturing

（责编　晓月）