



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

DQ.0367.2025

Noviembre 11, 2025

Dr. Román Linares Romero
Presidente del Consejo Divisional
de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería
PRESENTE

A través de este medio le solicito incluir en el orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional, la solicitud de contrato como profesor visitante del Dr. Luis Fernando Cofas Vargas, del 1 de diciembre de 2025 al 30 de noviembre de 2026.

Agradezco su atención a la presente y le envío un cordial saludo.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Juan Marcos Esparza Schulz
Jefe del Departamento de Química

UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco No. 186, Col. Leyes de Reforma 1ª. Sección, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09310, Ciudad de México.
Edificio R primer piso. Oficina R-118. Apartado Postal 55-534. Tel: (52)5804-4665.

E-mail: quam@izt.uam.mx. <http://www.quimica.izt.uam.mx>

PROPUESTA PARA LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE

FOLIO

FECHA

DÍA MES AÑO
11 11 2025

CONFORME A LO PREVISTO EN EL REGLAMENTO DE INGRESO, PROMOCIÓN Y PERMANENCIA DEL PERSONAL ACADÉMICO, SE PROPONE LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE, PARA OCUPAR CON CARÁCTER TEMPORAL LA SIGUIENTE PLAZA:

TIEMPO DE DEDICACIÓN COMPLETO		NÚM. DE HORAS (SOLO TIEMPO PARCIAL) DE CLASE:		DE OTRAS ACTIVIDADES ACADÉMICAS:	
UNIDAD I7TAPAI APA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA			
DEPARTAMENTO QUÍMICA		HORARIO LUNES A VIERNES DE 9:00 A 17:00 HORAS			
DURACIÓN DE LA LA CONTRATACIÓN		FECHA DE INICIO DE LABORES		FECHA DE TÉRMINO DE LABORES	
		DÍA MES AÑO 1 12 2025		DÍA MES AÑO 30 11 2026	

ACTIVIDADES A REALIZAR

LAS PROFESORAS Y LOS PROFESORES TITULARES DEBERÁN, ADEMÁS DE PODER REALIZAR LAS FUNCIONES DE LAS Y LOS ASISTENTES Y EL PROFESORADO CON CATEGORÍA DE ASOCIADO, PLANEAR, DEFINIR, ADECUAR, DIRIGIR, COORDINAR Y EVALUAR PROGRAMAS ACADÉMICOS EN EL ÁREA DE BIOFÍSICOQUÍMICA RESPONSABILIZÁNDOSE DIRECTAMENTE DE LOS MISMOS. REALIZAR LAS ACTIVIDADES ESTABLECIDAS EN EL ARTÍCULO 7-4 DEL RIPPPA Y DEMÁS NORMAS APLICABLES. REALIZAR LAS FUNCIONES DE DOCENCIA, INVESTIGACIÓN, DIFUSIÓN Y PRESERVACIÓN DE LA CULTURA. IMPARTIR CURSOS RELACIONADOS CON LOS PROGRAMAS DOCENTES DE QUÍMICA. REALIZAR LAS SIGUIENTES ACTIVIDADES:

1. IDENTIFICAR INHIBIDORES ALOSTÉRICOS DE LA ATP SINTASA DE ESCHERICHIA COLI MEDIANTE CRIBADO VIRTUAL Y SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR.
2. REFINAR LA SELECCIÓN DE POSIBLES INHIBIDORES Y ADQUIRIRLOS CON EL PROVEEDOR COMERCIAL.

LA PLAZA HABRÁ DE SER OCUPADA POR:

APELLIDO PATERNO COFAS		APELLIDO MATERNO VARGAS		NOMBRE (S) LUIS FERNANDO			CURP [REDACTED]		
NACIONALIDAD MEXICANA	R.F.C. [REDACTED]	FECHA DE NACIMIENTO	DÍA [REDACTED]	MES [REDACTED]	AÑO [REDACTED]	EDAD 37	SEXO MASCULINO		
ESTADO CIVIL [REDACTED]	TELÉFONOS [REDACTED]		CORREO ELECTRÓNICO [REDACTED]@gmail.com						
CALLE: [REDACTED]	NÚM. EXT. [REDACTED]					EDIF. [REDACTED]		DEPTO. [REDACTED]	
COLONIA, FRACC. O UNIDAD HABITACIONAL [REDACTED]									
DELEGACIÓN O MUNICIPIO: [REDACTED]					ESTADO: [REDACTED]			CÓDIGO POSTAL [REDACTED]	

DOCUMENTOS QUE SE ANEXAN:	CURRÍCULUM VITAE	☒	R.F.C.	☒	CURP	☒
	ACTA DE NACIMIENTO O CARTA DE NATURALIZACIÓN	☒	FORMA MIGRATORIA (FM)	☐	PASAPORTE	☐
				OTROS ESPECIFIQUE	☐	

Para uso exclusivo de la Comisión Dictaminadora

Aprobada en la Sesión Num. _____	Categoría: _____	Nivel: _____	Puntaje: _____
del Consejo Divisional de fecha DÍA MES AÑO	FECHA: DÍA MES AÑO		

NOTA: DENTRO DE LOS DIEZ DÍAS HÁBILES TRANSCURRIDOS A PARTIR DE LA RECEPCIÓN DE ESTA NOTIFICACIÓN DE INICIO DE LABORES EN LA RECTORÍA GENERAL, LA PERSONA GANADORA DEBERÁ ACUDIR AL ÁREA ASIGNADA EN SU UNIDAD UNIVERSITARIA DE ADSCRIPCIÓN PARA LA FIRMA AUTÓGRAFA DEL CONTRATO DE TRABAJO CORRESPONDIENTE.

PERSONA QUE INGRESARÁ COMO PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE LUIS FERNANDO COFAS VARGAS NOMBRE Y FIRMA	PERSONA TITULAR DE LA PRESIDENCIA DEL CONSEJO DIVISIONAL ROMÁN LINARES ROMERO NOMBRE Y FIRMA	PERSONA TITULAR DE LA PRESIDENCIA DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA NOMBRE Y FIRMA	PERSONA TITULAR DE LA SECRETARÍA DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA NOMBRE Y FIRMA
--	--	--	---

T1 DIPPPA
T2 COMISIÓN DICTAMINADORA DIVISIONAL
T3 JEFATURA DE DEPARTAMENTO

T4 RECTORÍA DE UNIDAD
T5 DIRECTOR DE DIVISIÓN
T6 CONSEJO DIVISIONAL

NOTA: SE UTILIZA ÚNICAMENTE AL REVERSO DEL TANTO 1

Vo. BO. PLANTILLA DE UNIDAD	
SELO	

Vo. BO. PLANTILLA DE RECTORÍA GENERAL	
SELO	

CODIFICACIÓN INTERNA (No. DE PLAZA EN PLANTILLA)
248
CONTROL DE PLANTILLA
NOMBRE Y FIRMA

**DECLARACIÓN PARA ASPIRANTES A FORMAR
PARTE DEL PERSONAL ACADÉMICO DE LA
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**

FECHA	DÍA	MES	AÑO
	11	11	2025

DRA. ESTHELA IRENE SOTELO NÚÑEZ

PERSONA TITULAR DE LA SECRETARÍA GENERAL

Conforme al requisito establecido en el artículo 3, último párrafo del Reglamento de Ingreso, Promoción y Permanencia de Personal Académico (RIPPPA), para ser aspirante a formar parte del personal académico de la Universidad Autónoma Metropolitana, manifiesto bajo protesta de decir verdad:

A CONTINUACIÓN ELIJA LA OPCIÓN SEGÚN CORRESPONDA:

a) EN CASO DE NO HABER SIDO SANCIONADA(O) ☒

Que no se me ha sancionado mediante resolución firme emitida por alguna autoridad jurisdiccional o administrativa, por actos u omisiones relacionadas con violencia por razones de género u otras violaciones graves a derechos humanos.

b) EN CASO DE HABER SIDO SANCIONADA(O) ☐

Que he cumplido con la reparación del daño o la reparación integral a las víctimas por haber sido sancionada(o) mediante resolución emitida por alguna autoridad jurisdiccional o administrativa, por actos u omisiones relacionadas con violencia por razones de género u otras violaciones graves a derechos humanos.

Describe y adjunte al presente la documentación que acredita lo anterior.

PERSONA INTERESADA

LUIS FERNANDO COFAS VARGAS

NOMBRE Y FIRMA

T1 SECRETARÍA GENERAL
T2 UNIDAD DE ADSCRIPCIÓN
T3 PERSONA INTERESADA

Propuesta de actividades para el primer año como profesor visitante en el departamento de Química

Profesor visitante:



Dr. Luis Fernando Corias Vargas

Proyecto:

Desarrollo de nuevos inhibidores alostéricos de la ATP sintasa de *Escherichia coli*

Periodo:

1 de diciembre de 2025 – 30 de noviembre de 2026

Departamento de Química, UAM - Unidad Iztapalapa
Área: Biofísicoquímica

Índice

1. Desarrollo del proyecto de investigación.....	3
2. Impartición de UEAs a nivel licenciatura.....	4
2.1 UEAs de la Licenciatura en Química.....	4
3. Formación de recursos humanos.....	4
3.1 Asesoría en proyectos terminales y tesis.....	4
3.2 Incorporación de estudiantes de posgrado.....	5
4. Fortalecimiento de la labor investigativa.....	5
4.1 Artículos de investigación en revistas indizadas.....	5
4.2 Artículos de divulgación.....	5
5. Difusión de la investigación.....	5
6. Búsqueda de fondos internos y externos a la UAM.....	5
7. Redes de colaboración internacional.....	6
8. Actividades de divulgación.....	6
9. Participación en congresos.....	6
10. Desarrollo de material de apoyo a la docencia.....	6

1. Desarrollo del proyecto de investigación

El objetivo central de este proyecto es identificar inhibidores alostéricos de la ATP sintasa de *Escherichia coli* mediante un enfoque iterativo que integra simulaciones multiescala y validación experimental. Para alcanzar este propósito, se proponen dos fases metodológicas que abarcan la detección y selección de moléculas candidatas mediante diversas estrategias computacionales.

Fase 1: Identificación de posibles inhibidores (Meses 1–6)

En esta primera etapa se realizará un **cribado virtual de gran escala** empleando quimiotecas comerciales de compuestos disponibles internacionalmente. El acoplamiento molecular se llevará a cabo con múltiples programas (AutoDock Vina, rDock, MOE y GNINA), lo que permitirá comparar resultados y reducir sesgos metodológicos.

Los ligandos se evaluarán bajo criterios de:

- **Afinidad de unión calculada** (energía de acoplamiento).
- **Accesibilidad espacial al sitio alostérico**, analizada mediante mapeo de cavidades y volumen accesible.
- **Compatibilidad estereoquímica** con los residuos clave del pocket alostérico.

Una vez seleccionados los mejores candidatos, se realizarán **simulaciones de dinámica molecular** en dos niveles para:

- **Todos los átomos (AA)**: usando campos de fuerza AMBER ff19SB y solvente explícito OPC, con el fin de caracterizar las interacciones moleculares detalladas entre la proteína y ligandos seleccionados.
- **Grano grueso (CG, GōMartini 3)**: para explorar procesos dinámicos a mayor escala, como fluctuaciones conformacionales inducidas por ligandos.

Se espera concluir esta fase con una lista reducida (10–15 compuestos) con alto potencial inhibitorio.

Fase 2: Selección de candidatos y estudios computacionales avanzados (Meses 6–12)

Con los compuestos identificados en la Fase 1, se procederá a un refinamiento mediante técnicas avanzadas:

- **Cálculo de energías libres de unión** utilizando métodos como MM/PBSA, MM/GBSA y free energy perturbation (FEP).
- **Simulaciones de dinámica molecular dirigidas** (steered MD y umbrella sampling) para evaluar estabilidad de la unión y barreras energéticas.
- **Estudio de flexibilidad conformacional** de la enzima, analizando RMSF, PCA y modos normales, para determinar cómo los inhibidores modulan los estados funcionales.
- **Análisis de contactos proteína-ligando** (frecuencias de H-bonds, interacciones hidrofóbicas, puentes salinos) para identificar patrones de reconocimiento específicos.

La fase concluirá con la **publicación de resultados en una revista indizada** y con la preparación de solicitudes de financiamiento para dar continuidad a la validación *in vitro* de inhibidores.

2. Impartición de UEAs a nivel licenciatura

La docencia constituye un eje fundamental en el fortalecimiento académico. Se contempla la participación en cursos de la licenciatura y posgrado en Química, integrando los avances del proyecto a la enseñanza.

2.1 UEA de la Licenciatura en Química

Se propone la impartición de las asignaturas **Química Orgánica I** y **Química Orgánica II**, fundamentales en el plan curricular de la licenciatura. Estos cursos proporcionan al estudiante una base sólida en estructura, reactividad y mecanismos de reacción de los compuestos orgánicos, conocimientos indispensables para comprender procesos biológicos y aplicaciones en síntesis y farmacología.

La enseñanza se complementará con ejemplos actuales relacionados con la investigación biomédica y el diseño de moléculas bioactivas, fomentando que los alumnos vinculen la teoría con aplicaciones en el ámbito de la salud y la biotecnología.

Asimismo, se impartirá la UEA optativa **Diseño de Fármacos**, que permitirá a los estudiantes conocer metodologías modernas de identificación de ligandos, modelado molecular y simulación computacional. Esta asignatura integrará conceptos de química orgánica, bioquímica y química computacional, reforzando el carácter multidisciplinario de su formación y preparándolos para retos en investigación aplicada e innovación farmacéutica.

3. Formación de recursos humanos

3.1 Asesoría en proyectos terminales y tesis

Se contempla la codirección de al menos un proyecto terminal y una tesis de licenciatura enfocada en temas como modelado estructural, dinámica molecular de proteínas y análisis de inhibidores. Se fomentará la participación de estudiantes en congresos nacionales, seminarios internos y redacción de artículos de investigación.

3.2 Incorporación de estudiantes de posgrado

Se buscará la incorporación de al menos un estudiante de posgrado que dé continuidad a la línea de inhibidores alostéricos, asegurando la consolidación del área en la UAM-Iztapalapa. Esta incorporación fortalecerá la formación de capital humano especializado en biofísica computacional aplicada al diseño de antibióticos y fármacos.

4. Fortalecimiento de la labor investigativa

4.1 Artículos de investigación en revistas indizadas.

Publicación de un artículo sobre simulación multiescala de ATP sintasa y predicción de inhibidores.

4.2 Artículos de divulgación

Se contempla la redacción de al menos un artículo de divulgación en medios nacionales, como la *Revista Mexicana de Ciencias Biomédicas*; explicando el papel de los inhibidores alostéricos como estrategia emergente frente a bacterias multirresistentes.

5. Difusión de la investigación

Se organizarán seminarios en el Área de Biofísicoquímica con el propósito de promover la ciencia, dar a conocer los trabajos de investigadores nacionales e internacionales y fomentar posibles colaboraciones. Asimismo, se impulsará la organización de escuelas de verano y cursos especializados en la UAM-I, dirigidos a fortalecer la formación académica y la vinculación de los estudiantes con la comunidad científica.

6. Búsqueda de fondos internos y externos a la UAM

Durante el periodo se aplicará a convocatorias internas de la UAM, como el Programa Especial de Apoyo a la Investigación (PEAPDI), destinadas a fortalecer proyectos en curso y a financiar insumos básicos. A nivel nacional, se participará en convocatorias de la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI),

particularmente en los programas de Ciencia de Frontera y Proyectos Nacionales de Investigación e Incidencia.

Adicionalmente, se considerará la participación en programas de PRODEP y en convocatorias estatales de ciencia y tecnología, que constituyen un apoyo complementario para consolidar recursos de investigación. Asimismo, se utilizará la plataforma PIVOT-RP como herramienta de gestión y búsqueda de convocatorias, con el fin de identificar oportunidades estratégicas de financiamiento tanto nacionales como internacionales.

7. Redes de colaboración internacional

Se fortalecerán colaboraciones con:

- **Dr. Adolfo B. Poma (IPPT PAN, Polonia)**, experto en simulaciones multiescala.
- **Dr. Paulo Cesar Telles de Souza (ENS Lyon, Francia)**, en estudios de interacción proteína-ligando con simulaciones de grano grueso y el continuo desarrollo del campo de fuerza Martini.
- Colaboraciones con laboratorios nacionales de biofísica y biología estructural, fomentando proyectos conjuntos y movilidad estudiantil.

8. Actividades de divulgación

Se organizarán ciclos de seminarios y charlas de divulgación científica dirigidas a estudiantes y público general, resaltando la importancia del diseño de fármacos y el papel de la investigación básica en salud pública. Asimismo, se participará en actividades de Semana de la Ciencia y la Tecnología para promover vocaciones científicas.

9. Participación en congresos

- Presentación de al menos un trabajo en congresos como el de la Sociedad Mexicana de Bioquímica.

10. Desarrollo de material de apoyo a la docencia

Se elaborará un manual de simulación molecular aplicado a proteínas que incluirá prácticas en dinámica molecular, análisis de energía de interacción y diseño de inhibidores. Este material estará disponible en formato digital para estudiantes de licenciatura y posgrado, complementando la enseñanza de cursos en biofísica y

química computacional. Además, se generarán scripts y tutoriales interactivos para uso en clase y para formación autodidacta.

Curriculum Vitae

Dr. Luis Fernando Cofas Vargas

Fecha de nacimiento:

Lugar de nacimiento:

Puesto de trabajo actual:

Profesor asistente

Department of Biosystems and Soft Matter

Institute of Fundamental Technological

Research

Polish Academy of Sciences

ul. Pawinskiego 5B

02-106 Warsaw, Poland

Estado Civil:

114

CURP:

RFC:

CVU:

114

ORCID: 

Google scholar: <https://scholar.google.com.mx/citations?user=H3gai84AAAAJ&hl=en>

Researchgate: https://www.researchgate.net/profile/Luis-Cofas-Vargas?ev=hdr_xprf

Scopus: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221527170>

1. Línea de investigación

Mi trabajo se centra en el reconocimiento molecular y la estabilidad conformacional de proteínas, utilizando enfoques computacionales y experimentales para entender sus mecanismos de interacción y regulación. A través de simulaciones de dinámica molecular multiescala y técnicas espectroscópicas, he abordado problemas en bioenergética, virología, biofísica estructural y farmacología molecular, con aplicaciones en el diseño de fármacos y el desarrollo de estrategias terapéuticas.

La FoF₁-ATP sintasa ha sido un sistema central en mi investigación, tanto en organismos eucariotas como en patógenos bacterianos, dada su relevancia en la producción de ATP y su potencial como blanco terapéutico en enfermedades metabólicas y en estrategias antimicrobianas. He caracterizado sus sitios de unión a inhibidores y diseñado moduladores alostéricos mediante simulaciones de dinámica molecular y cálculos de energías de unión. En el ámbito antimicrobiano, estudié la farmacabilidad (“druggability”) del sitio de unión de aurovertina, un antibiótico fúngico que actúa sobre la subunidad F₁ de ATP sintasa. Mediante dinámica molecular libres y con solventes mixtos, así como con cálculos de energía libre, identifiqué residuos clave en la estabilización del inhibidor y su impacto en la dinámica conformacional de este sitio de unión, proporcionando una base para el diseño de inhibidores alostéricos específicos. En un trabajo paralelo, diseñé y caractericé inhibidores alostéricos dirigidos a la subunidad β de la ATP sintasa de *Escherichia coli*, empleando cribado virtual, dinámica molecular con solventes mixtos y minería de secuencias. Identifiqué sitios solventes en la región de unión a inhibidores y diseñé un péptido derivado de IF1, validado *in vitro*, que inhibe la actividad ATPasa en el rango micromolar. Estos estudios han permitido evaluar diferencias en la regulación conformacional de ATP sintasas de distintas especies y proporcionan una base estructural para el desarrollo de inhibidores con aplicaciones biomédicas y antimicrobianas.

Durante mi estancia postdoctoral en el laboratorio del Dr. Adolfo Poma, en la Academia Polaca de Ciencias, trabajé en la nanomecánica de la proteína de espiga del SARS-CoV-2 y su interacción con anticuerpos y nanocuerpos, empleando el enfoque GōMartini, un modelo de grano grueso optimizado para el estudio de grandes cambios conformacionales en biomoléculas. Analicé la mecanoestabilidad del dominio de unión al receptor (RBD) en variantes del virus (WT, Alpha, Delta y XBB.1.5), evaluando su resistencia mecánica mediante simulaciones de estiramiento (“pulling simulations”) y cuantificando las fuerzas de disociación con nanocuerpos. Complementé este análisis con simulaciones atómicas para caracterizar contactos críticos en la interfaz proteína-proteína y su impacto en la evasión inmunológica. Como parte del Martini Task force, he contribuido a la optimización del método GōMartini, adaptándolo para capturar

interacciones mecánicamente relevantes en sistemas proteína-proteína y proteína-ligando. Estas mejoras han permitido una modelización más precisa de complejos virales y ofrecen una base para el diseño racional de nanocuerpos con mayor estabilidad mecánica y eficacia frente a variantes emergentes del SARS-CoV-2.

He trabajado también en la estabilidad estructural y el desplegamiento térmico de proteínas utilizando una combinación de simulaciones y técnicas calorimétricas. Un ejemplo de esto es la aglutinina de germen de trigo (WGA), una lectina con aplicaciones potenciales en biomedicina debido a su capacidad de atravesar barreras epiteliales. Mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC) y simulaciones de dinámica molecular, he caracterizado su proceso de desplegamiento térmico, identificando diferencias en la estabilidad de sus dominios individuales y su impacto en la funcionalidad de la proteína.

Otro de los sistemas que he investigado es el de los canales iónicos y toxinas de escorpión, con especial énfasis en la interacción entre toxinas y canales de potasio. Un caso particular es Beta-KTx14.3, una toxina del escorpión *Lychas mucronatus*, que bloquea el canal de potasio humano KCNQ1, un canal clave en la regulación de la excitabilidad cardíaca. Utilizando simulaciones de dinámica molecular y modelado estructural, he analizado los mecanismos de bloqueo de la toxina y su impacto en la dinámica del canal, con posibles aplicaciones en el desarrollo de fármacos dirigidos a canalopatías.

En conjunto, mi investigación se ha centrado en el análisis de la estabilidad conformacional y el reconocimiento molecular en una variedad de sistemas biomoleculares de relevancia biológica y terapéutica. La combinación de modelado computacional con técnicas experimentales me ha permitido explorar mecanismos de interacción proteína-ligando y proteína-proteína desde un nivel atómico hasta simulaciones de grano grueso, con aplicaciones en bioenergética, virología y farmacología estructural.

2. Resumen Global

Formación académica

- **Grado máximo obtenido:** Doctor en Ciencias Bioquímicas

Producción científica

- **Artículos científicos:** 15 publicados, 1 en revisión, 2 en preparación
- **Citas:** 174 citas acumuladas
- **Índices bibliométricos:** H = 6, i10 = 4
- **Participación en congresos:** 9 presentaciones en congresos internacionales, 11 en congresos nacionales
- **Organización de eventos:** Coordinación de 1 evento nacional especializado

Docencia y formación de recursos humanos

- **Dirección de tesis:** 1 tesis de licenciatura concluida, 3 en curso
- **Cursos impartidos:** 8 cursos a nivel posgrado, 3 cursos a nivel licenciatura

Reconocimientos académicos

- 5 distinciones recibidas

3. Formación profesional

Doctorado en Ciencias Bioquímicas

Universidad Nacional Autónoma de México

Tesis: Explorando la farmacabilidad del sitio de unión a aurovertina, un inhibidor exógeno de la FoF₁-ATP sintasa.

Fecha de examen: Diciembre, 2022.

Cédula: Por tramitar

Maestría en Ciencias Bioquímicas

Universidad Nacional Autónoma de México

Tesis: Explorando el potencial farmacológico de la FoF₁-ATP sintasa: estudio estructural comparativo de los sitios de unión de inhibidores naturales del sector F₁ de diferentes especies.

Fecha de examen: Mayo, 2018.

Cédula:12757529

Licenciatura: Ingeniería Bioquímica Industrial

Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Proyecto: Estudio de prefactibilidad para establecer una empresa productora de ácido carmínico.

Fecha de examen: Diciembre, 2012.

Cédula: 08099985

4. Producción Científica

4.1. Publicaciones

Revistas indexadas

1. **Cofas-Vargas, L. F.**, Mendoza-Espinosa, P., Montalvo-Sandoval, F. D., Pérez-Rodríguez, S., Rauda-Ceja, J. A., Hernández-Peralta, P., ... & García-Hernández, E. A unified topology-based classification of sars-cov-2 rbd neutralizing antibodies systematizes affinity trends across variants. *mAbs*, 2025. DOI: 10.1080/19420862.2025.2575083
2. Citas A: 0 Citas B: 0 Citas totales: 0
3. Milewska A., **Cofas-Vargas, L. F.**, Poma, A. B., Pyrc, K. Evolution of the SARS-CoV-2 Spike Protein in Utilizing Host Transmembrane Serine Proteases. *iScience*, 2025. DOI: 10.1016/j.isci.2025.113318
Citas A: 0 Citas B: 0 Citas totales: 0
4. Hinostroza-Caldas, A., **Cofas-Vargas, L. F.**, Jones, M., Ferguson, A. L., Medrano-Sandonas, L. Poma, A. B. Recent Advances in Machine Learning and Coarse-Grained Potentials for Biomolecular Simulations and Their Applications. *Biophys. J.*, 2025. DOI: 10.1016/j.bpj.2025.06.019
Citas A: 0 Citas B: 0 Citas totales: 0
5. Souza, P. C. T., Borges-Araújo, L., Brasnett, C., Moreira, R. A., Grünewald, F., Park, P., Wang, L., Razmazma, H., Borges-Araújo, A. C., **Cofas-Vargas, L. F.**, Monticelli, L., Mera-Adasme, R., Melo, M. N., Wu, S., Marrink, S. J., Poma, A. B., Thallmair, S. GōMartini 3: From large conformational changes in proteins to environmental bias corrections. *Nature comm*, 2025. DOI: 10.1038/s41467-025-58719-0
Citas A: 29 Citas B: 12 Citas totales: 41
6. Olivos-Ramirez, E., **Cofas-Vargas, L.F.**, Madl, T., Poma, A. B. Conformational and stability analysis of SARS-CoV-2 spike protein variants by molecular simulation. *Pathogens*, 2025. DOI: 10.3390/pathogens14030274
Citas A: 1 Citas B: 0 Citas totales: 1
7. Ramírez-Cortés, A., Durán-Vargas, A., Rauda-Ceja, J. A., Mendoza-Espinosa, P., **Cofas-Vargas, L. F.**, Cruz-Rangel, A., Pérez-Carreón, J. L., García-Hernández, E. Targeting Human Prostaglandin Reductase 1 with Licochalcone A: Insights from Molecular Dynamics and Covalent Docking Studies. *Biophysical Chemistry*, 2025. DOI: 10.1016/j.bpc.2025.107508
Citas A: 0 Citas B: 0 Citas totales: 0
8. **Cofas-Vargas, L. F. †***, Olivos-Ramirez, G. E., Chwastyk, M., Moreira, R. A., Baker, J. L., Marrink, S. J., and Poma, A. B. Nanomechanical footprint of SARS-CoV-2 variants in complex with a potent nanobody by molecular simulations. *Nanoscale*, 2024. DOI: 10.1039/D4NR02074J
Citas A: 1 Citas B: 1 Citas totales: 2
9. Medrano-Cerano, J. L. †, **Cofas-Vargas, L. F. †**, Leyva, E. †, Rauda-Ceja, J. A., Calderón-Vargas, M., Cano-Sánchez, P., Titau-Delgado, G., Melchor-Meneses, C. M., Hernández-Arana, A., del Río-Portilla, F., García-Hernández, E. Decoding the Mechanism Governing the Structural Stability of Wheat Germ Agglutinin and Its Isolated Domains: A Combined

Calorimetric, NMR, and MD Simulation Study. *Protein Science*, 2024. DOI: 10.1002/pro.5020

Citas A: 0 Citas B: 1 Citas totales: 1

10. **Cofas-Vargas, L. F. †**; Moreira, Rodrigo A.; Poblete, Simón; Chwastyk, Mateusz; Poma, Adolfo B. The GōMartini approach: Revisiting the concept of contact maps and the modelling of protein complexes. *Acta Physica Polonica A*, 2024. DOI: 10.12693/APhysPolA.145.S9

Citas A: 2 Citas B: 2 Citas totales: 4

11. Titau-Delgado, G., Lopez-Giraldo, A.E., Carrillo, E., **Cofas-Vargas, L. F.**, Carranza, L.E., López-Vera, E., García-Hernández, E. and del Rio-Portilla, F. Beta-KTx14.3, a scorpion toxin, blocks the human potassium channel KCNQ1. *BBA - Proteins and Proteomics*, 2023. DOI: 10.1016/j.bbapap.2023.140906.

Citas A: 1 Citas B: 0 Citas totales: 1

12. **Cofas-Vargas, L.F.†**, Mendoza-Espinosa, P. †, Avila-Barrientos, L.P., Prada-Gracia, D., Riveros-Rosas, H., and Enrique García-Hernández. Exploring the druggability of the binding site of aurovertin, an exogenous allosteric inhibitor of FOF1-ATP synthase. *Frontiers in Pharmacology*, 2022, DOI: 10.3389/fphar.2022.1012008

Citas A: 3 Citas B: 4 Citas totales: 7

13. Avila-Barrientos, L. P. †; **Cofas-Vargas, L. F. †**; Agüero-Chapin, G.; Hernández-García, E.; Ruiz-Carmona, S.; Valdez-Cruz, N.A.; Trujillo-Roldán, M.; Weber, J.; Ruiz-Blanco, Y.B.; Barril, X.; García-Hernández, E. Computational Design of Inhibitors Targeting the Catalytic β Subunit of Escherichia coli FOF1-ATP Synthase. *Antibiotics*, 2022, 11, 557. DOI:10.3390/antibiotics11050557

Citas A: 3 Citas B: 7 Citas totales: 10

14. Valdez-Cruz, N.A., García-Hernández, E., Espitia, C., Cobos-Marín, L., Altamirano, C., Bando-Campos, C.G., **Cofas-Vargas, L. F.**, Coronado-Aceves, E.W., González-Hernández, R.A., Hernández-Peralta, P., Juárez-López, D., Ortega-Portilla, P.A., Restrepo-Pineda, S., Zelada-Cordero, P. & Trujillo-Roldán, M.A. Integrative overview of antibodies against SARS-CoV-2 and their possible applications in COVID-19 prophylaxis and treatment. *Microbial Cell Factories* 20, 88. 2021. DOI: 10.1186/S12934-021-01576-5

Citas A: 61 Citas B: 2 Citas totales: 63

15. Labra-Núñez, A.†, **Cofas-Vargas, L. F.†**, Gutiérrez-Magdaleno, G., Gómez-Velasco, H., Rodríguez-Hernández, A., Rodríguez-Romero, A., García-Hernández, E. Energetic and structural effects of the Tanford transition on ligand recognition of bovine β -lactoglobulin. *Arch Biochem Biophys*, 2021, mar 15;699:108750. DOI: 10.1016/j.abb.2020.108750

Citas A: 12 Citas B: 0 Citas totales: 12

† Primer autor

* Autor de correspondencia

En revisión

16. Cofas-Vargas, L. F., Olivos-Ramírez, G. E., Marrink, S. J., Poma B, A. Comparative nanomechanical analysis of antibodies and nanobodies against SARS-CoV-2 variants. *Nanoscale horizons*.

En preparación

17. Poblete, S., Poma, A. B., Cofas-Vargas, L. F., Tolmos, M., Medrano Sandonas, L. An RNA machine-learning force field for exploration of the conformational space.
18. Olivos-Ramírez, G. E., Cofas-Vargas, L. F., Marrink, S. J., Poma, A. B. Exploring the long-time dynamics of the SARS-CoV-2 spike protein variants by GōMartini 3 approach.

4.2. Congresos

4.2.1. Congresos internacionales

1. CECAM workshop The Dual Nature of Glycans in Protein-Protein Interactions: Bridging Computational and Experimental Insights. Cagliari, Italia. 2025. **Póster.**
2. Mini-Symposium on Computational Biophysics: From Machine Learning to Coarse-Grained Simulations. 2025. **Póster**
3. Biophysical Society 68th Annual Meeting. Philadelphia, USA. 2024. **Presentación oral y póster.**
4. Foro de estudiantes en biofísica. 2023. **Póster.**
5. Building Bridges in Computational Biophysics. II Virtual Mini-Symposium of SoBLA, 2022. **Póster.**
6. International Symposium On The Search Of New Antimicrobial Alternatives. A Multidisciplinary Perspective. Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, D.C., Colombia, 2021. **Presentación oral.**
7. Computer Simulation And Theory Of Macromolecules 2021. **Poster.**

4.2.2. Congresos nacionales

1. Cuarto Simposio en Producción y Regulación de Biofármacos. 2025. **Póster.**
2. Conferencia en Twitter LatinXChem 2023. **Póster.**
3. Simposio 22 del Instituto de Química, 2022. **Póster.**
4. Conferencia en Twitter LatinXChem 2022. **Póster.**
5. 1er Simposio Internacional de Bioinformática, 2022. **Ponente.**
6. Conferencia en Twitter #LatinXChem 2021. **Póster.**
7. Simposio Virtual del Instituto de Química, 2020. **Póster.**
8. VI Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Proteínas y VII Congreso de la Rama de Fisicoquímica, Estructura y Diseño de Proteínas, 2019. **Presentación oral.**
9. Simposio Interno del Instituto de Química, 2018. **Póster.**
10. Física Biológica Ciudad de México 2017: Fronteras en la interfaz de la Física, Matemáticas y Biología. **Póster.**
11. 6º Congreso de la Rama de Fisicoquímica, Estructura y Función de Proteínas, 2017. **Póster.**
12. Simposio Interno del Instituto de Química, 2016. **Póster.**
13. 5º Congreso de la Rama de Fisicoquímica, Estructura y Función de Proteínas, 2015. **Póster.**
14. 46º Congreso Mexicano de Química, 2011. **Póster.**

4.3. Organización de eventos especializados

1. Primer Taller de Biofísica Molecular. 16 al 18 de enero de 2019. Universidad Autónoma de México Iztapalapa, CDMX. Comité organizador: Ponciano García Gutiérrez, Rafael Arturo Zubillaga Luna, Jesús Alberto Ochoa Tapia, Orlando Guzmán López, **Luis Fernando Cofas Vargas**, Paola Mendoza Espinosa

5. Docencia y Formación de Recursos Humanos

5.1 Tesis dirigidas

Concluidas:

Licenciatura:

1. Calderón Vargas, Mateo. Descifrando el mecanismo de desplegamiento térmico de la aglutinina de germen de trigo mediante técnicas de simulación de dinámica molecular. Facultad de Ciencias. UNAM. 2020-2023.
https://tesiunam.dgb.unam.mx/F/GGBSISN7YRF62JBKGD741QTGS4ILJ2QEVGRPM8EIUMC5C5UVII-51469?func=full-set-set&set_number=075719&set_entry=000001&format=999

En proceso:

Licenciatura:

2. Romo López, Luis. Caracterización de la interacción del sector F_1 de la ATP sintasa con antibióticos policétidos de hongos. Facultad de Ciencias, UNAM. 2022-
3. Díaz de León Martínez, Rodrigo Arie. Dinámicas moleculares del sector F_1 de la ATP sintasa con micotoxinas. Facultad de Ciencias, UNAM. 2022-
4. Estrada Barrera, Alfredo. Cambio de la especificidad de la lisozima de huevo de gallina, de su actividad quitinasa a celulasa. Facultad de Ciencias Químico-Biológicas, Codirección con el Dr. Eneas Alejandro Chavelas Adame. UAGro. 2025-

5.5. Docencia

Cursos nivel posgrado

1. **Métodos avanzados de modelado molecular de grano grueso aplicados a biomoléculas**. Instituto de Química, UNAM, 2025.
2. **An introduction to molecular dynamics simulation and docking studies for applications in biomedical sciences**. Doctoral School, Information and Biomedical Technologies, Polish Academy of Sciences, 2025.
3. **Bases Moleculares del Reconocimiento Proteína-Ligando y su Aplicación en el Diseño de Fármacos**. Maestría y Doctorado en Ciencias Bioquímicas y Biología Molecular, UNAM. 2020-1 a la fecha. 7 semestres impartidos.

Cursos nivel licenciatura

4. **Visualización y Dinámica molecular de proteínas**. Facultad de Ciencias Químico-Biológicas. Universidad Autónoma de Guerrero. 2025.
5. **Introducción a la estructura de proteínas y su visualización molecular**. Facultad de Ciencias Químico-Biológicas, Programa Educativo de Biotecnología, Universidad Autónoma de Guerrero. 2023

Material didáctico y tutoriales en línea.

1. **Cofas-Vargas, L. F. and Poma, A. B.** Tutorial “Martini 3 – Protein complex models”.
Disponible en: cgmartini.nl/docs/tutorials/Martini3/ProteinsIIb

6. Reconocimientos a la Labor Académica

6.1. Reconocimientos y becas académicas

1. Selección de portada (Cover Feature), Nanoscale, Royal Society of Chemistry, Volume 16, Issue 40, 28 October 2024.
2. Biophysical Society 68th Annual Meeting Travel Award, 2024.
3. Mejor ponencia oral en la sesión de abordaje computacional en el Simposio Internacional de Búsqueda de Nuevas Alternativas Antimicrobianas: una perspectiva Multidisciplinar. Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, D.C., Colombia, 2021.
4. Becario CONACyT nivel doctorado (2018-2022).
5. Becario CONACyT nivel maestría (2013-2015).

7. Habilidades

Métodos biofísicos

- Dispersión dinámica de la luz (DLS)
- Termoforéisis
- Espectroscopía de fluorescencia
- Dicroísmo circular
- Calorimetría: diferencial de barrido (DSC) y titulación isotérmica (ITC)

Métodos bioquímicos

- Purificación de proteínas por cromatografía líquida y de afinidad
- Electroforesis en gel (SDS-PAGE, nativa)
- Ensayos de unión y actividad enzimática

Biología molecular

- Clonación y expresión de proteínas recombinantes

Métodos computacionales

- Modelado por homología y preparación estructural
- Parametrización de ligandos
- Cálculos de energía libre de punto final (MM/PBSA, MM/GBSA)
- Simulaciones de dinámica molecular con AMBER y GROMACS
- Configuración de sistemas con campos de fuerza AMBER, CHARMM y Martini
- Docking molecular y cribado virtual de alto rendimiento

Programación y análisis de datos

- Scripting en Python y Bash para automatización de tareas (preparación de estructuras, filtrado, cálculo de energías)
- Análisis de simulaciones con herramientas como AmberTools, MDAnalysis, PyEMMA, UCSF Chimera, VMD, PyMOL
- Gestión y curación de bases de datos de proteínas y compuestos orgánicos
- Análisis conformacional mediante modelos de estados de Markov (MSM), clustering (k-means, jerárquico, etc.)

Computación y sistemas

- Usuario intermedio de sistemas operativos **Linux**
- Experiencia en computación de alto rendimiento:
 - Miztli (UNAM)
 - Yoltla (UAM)
 - Ares, Athena y Helios (PL-Grid, Polonia)
- Ensamblaje y mantenimiento de servidores, instalación y compilación de software especializado en modelado molecular.

8. Estancias

Estancia de investigación corta – ENS de Lyon, Francia (2 semanas)

Con el *Dr. Paulo Cesar Telles de Souza, LBMC-CNRS*

Parametrización y validación de inhibidores de la ATP sintasa utilizando el campo de fuerza de grano grueso Martini 3

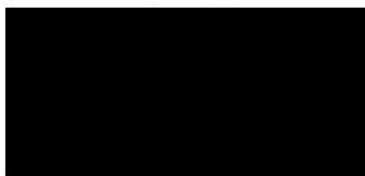
Fechas: del 23 de junio al 4 de julio de 2025

9. Experiencia Laboral

1. Profesor asistente/Posdoc. Institute of Fundamental Technological Research
2. Polish Academy of Sciences. Junio 2023 a la fecha.
3. Auxiliar de desarrollo de formulaciones cosméticas. Febrero 2017-Enero 2018.
4. Jefe de desarrollo de formulaciones cosméticas. Enero 2015-Diciembre 2016

A t e n t a m e n t e

CDMX, a 29 de octubre de 2025



Dr. Luis Fernando Cofas Vargas