



FLORENCIA SOLEDAD  
KLEIN ROCHA

PhD

[fklein@pasteur.edu.uy](mailto:fklein@pasteur.edu.uy)  
[www.sirahff.com](http://www.sirahff.com)

Mataojo 2020  
2522 0910

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas  
Categorización actual: Iniciación (Asociado)

Fecha de publicación: 22/04/2024  
Última actualización: 02/03/2024

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) / Institut de Biologie Physico-Chimique / Francia

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: CNRS / Sector Extranjero/Internacional/Otros  
/ Institut de Biologie Physico-Chimique

Dirección: 13 rue Pierre et Marie Curie, / 75005

País: Francia / Paris / Paris

Teléfono: (11400) 2522 0910

Correo electrónico/Sitio Web: [fklein@pasteur.edu.uy](mailto:fklein@pasteur.edu.uy) <http://pasteur.uy/en/home>

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Posgrado en Química (2019 - 2022)

Universidad de la República - Facultad de Química, PEDECIBA Química, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Desarrollo in-silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular

Tutor/es: Sergio Pantano

Obtención del título: 2022

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

#### MAESTRÍA

##### Posgrado en Química - UdelaR/PEDECIBA (2016 - 2019)

Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Desarrollo in silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular

Tutor/es: Sergio Pantano

Obtención del título: 2019

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Biofísica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

#### GRADO

##### Licenciatura en Bioquímica (2010 - 2015)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio de la glicosilación temprana en Histona H1

Tutor/es: Laura Coitiño

Obtención del título: 2015

Palabras Clave: Glicación Oxidación Histona H1

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica

## Formación complementaria

### CONCLUIDA

#### CURSOS DE CORTA DURACIÓN

##### **3rd Annual Workshop on Advanced Microscopy and Biophotonics (11/2021 - 11/2021)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

##### **Curso de Programación, Estructuras de Datos y Algoritmos (03/2020 - 06/2020)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería , Uruguay  
Palabras Clave: Curso especializado en Python

##### **Técnicas de Regresión y Análisis multivariado con R (03/2019 - 03/2019)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina

## Idiomas

### Inglés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### Francés

Entiende muy bien / Habla bien / Lee bien / Escribe bien

## Áreas de actuación

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

## Actuación profesional

### SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - FRANCIA

Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) / Institute of Physico-Chemical Biology-Laboratoire de Biochimie Théorique

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### **Funcionario/Empleado (07/2022 - a la fecha)**

PostDoc 40 horas semanales

#### **SECTOR ORGANIZACIONES PRIVADAS SIN FINES DE LUCRO/SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - INSTITUT PASTEUR DE MONTEVIDEO - URUGUAY**

Institut Pasteur de Montevideo

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### **Funcionario/Empleado (03/2016 - 07/2022)** Trabajo relevante

Investigador Asistente Nivel 4 30 horas semanales

## SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - FRANCIA

Universidad Paris Descartes / Faculté de Pharmacie, Laboratoire CiTCoM - Cibles Thérapeutiques et Conception de Médicaments

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Becario (11/2019 - 12/2019)

Pasantía 40 horas semanales / Dedicación total  
Pasantía bajo la tutela de la Dra. Samuela Pasquali en la Université Paris Descartes

### ACTIVIDADES

#### PASANTÍAS

#### Pasantía titulada: Constant pH in Coarse-grained simulations (11/2019 - 12/2019)

Faculté de pharmacie, Laboratoire CiTCoM - Cibles Thérapeutiques et Conception de Médicaments 40 horas semanales

## SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Ciencias

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Funcionario/Empleado (05/2015 - 03/2016) Trabajo relevante

Ayudante de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

#### Funcionario/Empleado (08/2014 - 12/2014) Trabajo relevante

Ayudante de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

#### Colaborador (08/2013 - 12/2013)

Apoyo en el curso Predicción y análisis in silico (computacional) de la estructura, interacción y lo 20 horas semanales  
Escalafón: No Docente

### ACTIVIDADES

#### DOCENCIA

#### Licenciatura en Bioquímica (08/2014 - 12/2014)

Grado  
Asistente  
Asignaturas:  
Fisicoquímica Moderna, 20 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica

#### CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas  
Carga horaria de investigación: 60 horas  
Carga horaria de formación RRHH: Sin horas  
Carga horaria de extensión: Sin horas  
Carga horaria de gestión: Sin horas

## Producción científica/tecnológica

### Producción bibliográfica

#### ARTÍCULOS PUBLICADOS

##### ARBITRADOS

###### **The SIRAH force field: A suite for simulations of complex biological systems at the coarse-grained and multiscale levels (Completo, 2023)**

F. KLEIN , Soñora, M. , Lucianna Helene Silva Santos , Ezequiel Nazareno Frigini , Ballesteros-Casallas Andres , M. MACHADO , PANTANO S  
Journal of Structural Biology, v.: 215 3 , 2023  
ISSN: 10478477  
E-ISSN: 10958657  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsb.2023.107985>

Scopus'

###### **Hitting the Detection Limit in cAMP Signaling (Completo, 2022)**

F. KLEIN , M. MACHADO , PANTANO S  
Function, v.: 3 5 , 2022  
Medio de divulgación: Internet  
E-ISSN: 26338823  
DOI: <https://doi.org/10.1093/function/zqac038>

###### **The SIRAH-CoV-2 Initiative: A Coarse-Grained Simulations' Dataset of the SARS-CoV-2 Proteome (Completo, 2021)**

Pablo G. Garay , Exequiel E. Barrera , F. KLEIN , M. MACHADO , Soñora, M. , PANTANO S  
Frontiers in Medical Technology, v.: 3 2021  
Medio de divulgación: Internet  
E-ISSN: 26733129  
DOI: <https://doi.org/10.3389/fmedt.2021.644039>

###### **Assessing SIRAH's Capability to Simulate Intrinsically Disordered Proteins and Peptides (Completo, 2021)**

F. KLEIN , Exequiel E. Barrera , PANTANO S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 17 p.:599 - 604, 2021  
Palabras clave: SIRAH IDPs Coarse-grained  
E-ISSN: 15499626  
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00948>  
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.0c00948>

Scopus'

###### **CUTie2: The Attack of the Cyclic Nucleotide Sensor Clones (Completo, 2021)**

F. KLEIN , SARDI, F. , M. MACHADO , ORTEGA, C , COMINI MA , PANTANO S  
Frontiers in Molecular Biosciences, v.: 8 p.:1 - 8, 2021  
Palabras clave: CUTie2 FRET Sensor SIRAH Coarse-grained  
E-ISSN: 2296889X  
DOI: <https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.629773>

Scopus'

###### **Coarse-Grained Parameters for Divalent Cations within the SIRAH Force Field (Completo, 2020)**

Florencia Klein , Daniela Caceres , Mónica A. Carrasco , Juan Carlos Tapia , Julio Caballero , Jans Alzate-Morales , PANTANO S  
Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 60 8 , - 3935, 2020  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: 3943  
ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00160>

Scopus

#### **New red-shifted fluorescent biosensor for monitoring intracellular redox changes (Completo, 2019)**

PIATTONI CV , SARDI, F., F. KLEIN , PANTANO S, BOLLATI-FOGOLIN M , COMINI MA  
Free Radical Biology and Medicine, v.: 134 p.:545 - 554, 2019

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 08915849

E-ISSN: 18734596

DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2019.01.035](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2019.01.035)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

#### **The SIRAH 2.0 Force Field: Altius, Fortius, Citius (Completo, 2019)** Trabajo relevante

M. MACHADO , Exequiel Barrera , F. KLEIN , Soñora, M. , S.Silva , PANTANO S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 15 p.:2719 - 2733, 2019

ISSN: 15499618

E-ISSN: 15499626

DOI: [10.1021/acs.jctc.9b00006](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00006)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

## LIBROS

#### **cAMP signaling ( Participación , 2021)**

F. KLEIN , ABREU C. , PANTANO S

Publicado

Editorial: Springer Nature , US

Tipo de publicación: Investigación

DOI: [10.1007/978-1-0716-2245-2](https://doi.org/10.1007/978-1-0716-2245-2)

Referado

Escrito por invitación

Palabras clave: cAMP cGMP SIRAH Coarse-Grain Molecular dynamics CUTie

Medio de divulgación: Internet

ISSN/ISBN: 1940-6029

Aceptado, esperando publicación

Capítulos:

How to make the CUTiest sensor in 3 simple steps for computational pedestrians

Organizadores: Dra. Manuela Zaccolo

Página inicial 0, Página final 1

## Producción técnica

### OTRAS PRODUCCIONES

### CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

#### **4th Protein Biophysics at the end of the world (2019)**

M. MACHADO , PANTANO S, F. KLEIN , Exequiel E. Barrera , Soñora, M.

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Español

Tipo de participación: Organizador

#### **Openlab: Performing Molecular Simulations with SIRAH force field (2017)**

PANTANO S, M. MACHADO , F. KLEIN , Exequiel E. Barrera , Soñora, M.

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Inglés

Tipo de participación: Organizador

## ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

### International Conference on Bioinformatics (2019)

M. PAULINO , F. KLEIN , Soñora, M. , ALVAREZ-VALIN, F  
Congreso  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Facultad de Ingeniería Montevideo  
Idioma: Inglés  
Web: <https://sites.google.com/view/soibio19/>  
Institución Promotora/Financiadora: Udelar-PEDECIBA  
Información adicional: Steering Committee

## Otros datos relevantes

### PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

#### Premio en Ciencias Químicas (2022)

(Nacional)  
PEDECIBA Química  
Mención especial

#### Rubio Santoro - García Varela (2022)

(Nacional)  
Institut Pasteur de Montevideo  
Premio a mejor tesis de doctorado desarrollada y defendida en el IPMon.

#### FP Dynamo Paris cofund fellowship programme (2022)

(Internacional)  
Becas Marie Skłodowska-Curie

#### Beca de Finalización de Maestría CAP (BFPM\_2019\_1#46776132) (2018)

(Nacional)  
Comisión Académica de Posgrado  
No usufructuada

#### Beca de Doctorado (POS\_NAC\_2018\_1\_151183) (2018)

(Nacional)  
ANII  
Período 2019-2021, finalizada

#### Beca de maestría (POS\_NAC\_2016\_1\_130039) (2016)

(Nacional)  
ANII  
Período 2017-2019

#### Mención a mejor trabajo (2015)

(Nacional)  
PAIE-CSIC  
El trabajo titulado "Modelado computacional de la interacción entre ácido oleico y alfa-Lactalbúmina en la formación de HAMLET y su búsqueda en l venganza antitumoral" salió con mención especial en las jornada EXPO CIERRE 2015

#### Beca de maestría (POS\_NAC\_2015\_1\_109858) (2015)

(Nacional)  
ANII  
No usufructuada

#### Beca de apoyo a docentes- CAP (BDMX\_2016\_1#46776132) (2015)

(Nacional)  
Comisión Académica de Posgrado

No usufructuada

**Programa de Apoyo a la Investigación Estudiantil (PAIE) (2013)**

(Nacional)

CSIC

"Modelado computacional de la interacción entre ácido oleico y alfa-Lactalbúmina en la formación de HAMLET y su búsqueda en la venganza antitumoral"

**Beca de Iniciación (INI\_X\_2012\_1\_4310) (2013)**

(Nacional)

ANII

Período 2013-2014

**Mención a mejor poster (2013)**

(Nacional)

Facultad de ciencias

Presentación del poster en Jornadas de +biofísica

**PRESENTACIONES EN EVENTOS**

**20th IUPAB Congress (2021)**

Congreso

Going messy: Assessing SIRAH's ability to simulate Intrinsically Disordered Proteins

Brasil

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SBBq y SBBf

**ENAQUI 7 (2021)**

Congreso

Diseño racional de biosensores de alta resolución, selectividad y reproducibilidad para detectar nucleótidos cíclicos por efecto FRET

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA

**Primer Encuentro Bienal de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2018)**

Encuentro

Caracterización biológica integrativa de un signalosoma de AMPc de tamaño nanométrico

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SBBM Palabras Clave: Sarcómero AMPc

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioquímica computacional

**IUBMB/IUPAB Advanced School and Workshop (2018)**

Simposio

Accurate prediction of FRET sensors for cyclic nucleotides

Cuba

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: IUBMB/ IUPAB Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioquímica computacional

**Gordon Research Conferences: Cyclic Nucleotide Phosphodiesterases (2018)**

Congreso

Integrative biology characterization of a nanosized cAMP signalosome

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

**Gordon Research Seminars: Cyclic Nucleotide Phosphodiesterases (2018)**

Seminario

Accurate prediction of FRET sensors for cyclic nucleotide

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

**Gordon Research Conferences: Cyclic Nucleotide Phosphodiesterases (2018)**

Congreso

Accurate prediction of FRET sensors for cyclic nucleotide

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

**Congreso Nacional de Biociencias (2017)**

Congreso

Diseño racional de biosensores de alta resolución, selectividad y reproducibilidad para detectar nucleótidos cíclicos por efecto FRET

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

**The 56th Sanibel Symposium (2016)**

Simposio

Modeling the interaction of oleic acid with two alpha-Lactalbumin folding variants: In route towards deciphering the molecular basis of HAMLET's antitumor activity

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: University of Florida, Quantum Theory Project Presentado por: Dra. Laura Coitiño

**XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2016)**

Congreso

In silico rationalized design of biosensors for detecting second messengers as cAMP/cGMP by FRET effect

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

**Jornada EXPO CIERRE (2015)**

Seminario

Programa de Apoyo a la Investigación Estudiantil (PAIE-CSIC)

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 7

Nombre de la institución promotora: CSIC Palabras Clave: Ácido oleico HAMLET alfa-Lactoalbúmina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica

**Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (2015)**

Congreso

In silico Studies of Histone H1's Early Glycation by Ribose and methylglyoxal and its Synergy with Protein Oxidation.

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: SBF.uy, Sociedad Argentina de Biofísica (SAB) Presentado por Dra. Laura Coitiño

**Sociedad Uruguaya de Biofísica (SUB) (2014)**

Congreso

Modelos de la Interacción entre el ácido oleico y alfa-Lactalbúmina en HAMLET: Camino a entender las causas de su actividad antitumoral

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias

### **10th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2014) (2014)**

Congreso

In silico Studies of Histone H1 Early Glycation by Ribose/Adenosine Diphosphate (ADP) Ribose and its Synergy with Protein Oxidation

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Facultad de Química, Pontificia Unidad Católica de Chile

### **Jornada de Seminarios del Instituto de Química Biológica (2014)**

Seminario

Seminarios del Instituto de Química Biológica (IQB)

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias

### **Jornadas de +biofísica (2013)**

Congreso

Reactividad comparada de residuos Lys de Histona H1 y su modificación post-traducción por glicación con ribosa

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioquímica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica

## **Indicadores de producción**

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>9</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	8
Completo	8
<b>Libros y Capítulos</b>	1
Capítulos de libro publicado	1
<b>Otros tipos</b>	3
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>3</b>