

TANA TANDARIĆ

dr. sc., polje kemija

Računalno istraživanje, razvoj i istraživanje lijekova

✉ tana.tandacic@irb.hr

📧 sfgdq2IAAAAJ

☎ +385996022136

📠 tana-tandacic-88b045151

📍 Zagreb, Croatia

🌐 bananatana

Datum i godina rođenja: 6. lipnja 1992., Zagreb, Hrvatska

Državljanstvo: Hrvatsko

OSOBNI PROFIL

Specijalizirana sam za **računalnu kemiju**, s posebnim naglaskom na **računalnu biokemiju**. U svom istraživanju primjenjujem **kvantnu kemiju (QM)**, **molekulsku dinamiku (MD)**, **molekulsko uklapanje** te **metode perturbacije slobodne energije (FEP)** za proučavanje različitih bioloških sustava. Usko surađujem s eksperimentalnim istraživačima kako bih doprinijela racionalnom dizajnu lijekova, s ciljem optimizacije farmakokinetičkih i farmakodinamičkih svojstava lijekova.

RADNO ISKUSTVO

Znanstveni suradnik

Institut Ruđer Bošković

📅 10/2024 – danas

📍 Zagreb, Hrvatska

- Istraživanje alosteričkih mreža GPCR receptora računalnim metodama

Poslijedoktorand

Sveučilište u Uppsali, Åqvist Grupa

📅 10/2022 – 10/2024

📍 Uppsala, Švedska

- Korištenje MD i FEP simulacija za istraživanje vezanja liganda i selektivnosti prema adenozijskim receptorima
- Razvijanje in silico protokola za lociranje alosteričkih veznih mjesta unutar GPCR receptora
- Sudjelovanje u nastavi na predmetu "Molekularna i statistička mehanika"
- Mentoriranje diplomanada

Gostujući znanstvenik

Max Perutz Laboratoriji, Žagović Group

📅 03/2022 – 09/2022

📍 Beč, Austrija

- Istraživanje dinamike Phe-tRNA izomera i alosteričkih mreža unutar molekule korištenjem MD simulacija i izračuna relativne entropije (PARENT)
- Istraživanje reakcijskog mehanizma aa-tRNA izomerizacije (QM)

Asistent

Institut Ruđer Bošković

📅 12/2016 – 06/2022

📍 Zagreb, Hrvatska

- Istraživanje reakcijskog mehanizama inhibicije enzima MAO B propargilaminskim inhibitorima korištenjem MD, QM i EVB simulacija
- Sudjelovanje u nastavi na predmetu „Opća kemija sa stehiometrijom“, Sveučilište u Zagrebu

Student volonter

Farmaceutsko biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

📅 2013 – 2016

📍 Zagreb, Hrvatska

- Korištenje NMR spektroskopije, organske sinteze i QM izračuna za istraživanje razgradnje lijekova unutar procesa obrade otpadnih voda

Studentska praksa

Klinika za tumore, KBC Sestre milosrdnice

📅 02/2016 – 08/2016

📍 Zagreb, Hrvatska

- Provođenje biokemijskih, hematoloških, genetskih i citoloških analiza u bolničkom laboratoriju

METODE

Računalne metode:

- MD simulacije (Gromacs, Amber, Q)
- QM metode (Gaussian, Orca)
- QM/MM metode (Gaussian, Orca)
- FEP simulacije (Q, QresFEP, QligFEP)
- EVBS simulacije (Q)
- Molekularno uklapanje (AutoDock Vina, Schrödinger Maestro)
- Unix operativni sustavi
- Bash skriptiranje
- Python 3 (numpy, pandas, seaborn, matplotlib, scipy, plotly, cufflinks, mdtraj)
- PARENT

Eksperimentalne tehnike

- NMR spektroskopija
- Cryo EM (priprema i zamrzavanje uzoraka, prikupljanje i analiza podataka)
- Korištenje automatskih hematoloških i biokemijskih analizatora
- qPCR & RT-PCR

OBRAZOVANJE

Doktor znanosti, polje kemija

Sveučilište u Zagrebu

📅 10/2016 – 02/2021

Magistra medicinske biokemije

Sveučilište u Zagrebu

📅 09/2011 – 09/2016

BORAVCI NA STRANIM INSTITUCIJAMA

Sveučilište Sorbonne

11/2019 – 12/2019

Paris, France

- QM/MM izračuni katalizatora na bazi ciklodekstrina, mentor prof. Etienn Derata

National Institute of Chemistry

10/2018 - 11/2018

Ljubljana, Slovenia

- EVB izračuni MAO enzima, mentor prof. Janez Mavri

PUBLIKACIJE

21 publikacija

319 citata

h-index: 11

Odabrane publikacije

- **Tandarić, T.**, Gutierrez de Teran, H. (2025) Ligand and Residue Free Energy Perturbations Solve the Dual Binding Mode Proposal for an A_{2B}AR Partial Agonist. *Journal of Physical Chemistry B*. 129(3), 886-899.
- Prieto-Díaz, R., Fojo-Carballo, H., Majellaro, M., **Tandarić, T.**, Azuaje, J., Brea, J., Loza, M. I., Barbazán, J., Salort, G., Chotalia, M. et al. (2024) Exploring Biginelli-based scaffolds as A2B adenosine receptor antagonists: Unveiling novel structure-activity relationship trends, lead compounds, and potent colorectal anticancer agents. *Biomedicine & pharmacotherapy*, 173, 116345, 27.
- **Tandarić, T.**, Prah, A., Stare, J., Mavri, J. & Vianello, R. (2020) Hydride Abstraction as the Rate-Limiting Step of the Irreversible Inhibition of Monoamine Oxidase B by Rasagiline and Selegiline: A Computational Empirical Valence Bond Study. *International journal of molecular sciences*, 21 (17), 6151, 13.
- **Tandarić, T.** & Vianello, R. (2019) Computational Insight into the Mechanism of the Irreversible Inhibition of Monoamine Oxidase Enzymes by the Antiparkinsonian Propargylamine Inhibitors Rasagiline and Selegiline. *ACS Chemical Neuroscience*, 10 (8), 3532-3542.

Disertacije

- Računalno istraživanje mehanizma ireverzibilne inhibicije enzima monoamin-oksidaze B, mentor: dr. sc. Robert Vianello

NAGRADE

- **2024:** Najbolji poster (EFMC Virtual Event)
- **2022:** Nagrada za mladog znanstvenika u području medicinske i farmaceutske kemije (Hrvatsko kemijsko društvo, Selvita d.o.o.)
- **2021:** Stipendija Austrijske akademije znanosti i umjetnosti (JESH - Hrvatska) za boravak od šest mjeseci u laboratorijima Maxa Perutza (Beč, Austrija)
- Godišnja nagrada Instituta Ruđer Bošković za objavljeni znanstveni rad u **2019.** i **2020.** godini
- **2019:** Thiene poster award, 16th European Symposium of Organic Reactivity, Dubrovnik
- **2019:** Stipendija francuske vlade za jednomjesečni boravak na Sveučilištu Sorbonne (Pariz, Francuska)

REFERENCE

Prof. Hugo Gutierrez-de-Teran

Sveučilište u Uppsali, Uppsala, Švedska

hugo.gutierrez@icm.uu.se

Prof. Bojan Žagrović

Max Perutz Laboratoriji, Beč, Austrija

bojan.zagrovic@univie.ac.at

Prof. Janez Mavri

Kemijski Institut, Ljubljana, Slovenia

janez.mavri@ki.si

JEZICI

- **Materinji jezik:** Hrvatski
- **C2:** Engleski
- **B2:** Njemački
- **B1:** Talijanski

OSTALE VJEŠTINE

- Vozačka dozvola – B kategorija
- RYS TT 200 certificirani joga učitelj
- Speleolog pripravnik