

WOUTERS Johan



Université de Namur (UNamur),
Chemistry Department
61 Rue de Bruxelles
5000 Namur (Belgique)

Phone. : +32 81724550 (office)
E-mail johan.wouters@unamur.be

Personalia

- Belgian, born at Huy (Belgium) May 10th 1969, married, 2 children.

Professional activities

Current position

- Full Professor UNamur.
- Head of Chemistry Department (UNamur)

Past positions

- | | |
|-----------|--|
| 2004-2022 | - Director of Unité de Chimie Physique Théorique et Structurale (UNamur) |
| 2020-2022 | - Member of the board of UNamur (vice-président Conseil d'Administration) |
| 2019-2020 | - Head of Chemistry Department (UNamur) |
| 2014-2015 | - Director of AudioVisuel Service SAVE (UNamur) |
| 2009-2011 | - Head of Chemistry Department (UNamur) |
| 2004- | - Professor at UNamur |
| 2001-2004 | - Senior Research Associate at IRMW (Brussels, Belgium) |
| 1998-2001 | - Research Associate, UNamur-FUNDP |
| 1995-1997 | - Research Associate, FNRS, UNamur-FUNDP |
| 1996 | - post-doctoral stay, IBS, Grenoble (France), Dr O. Dideberg |
| 1995 | - post-doctoral stay, Institut für Anorg. Chemie, Göttingen (Germany), Dir.: Prof. G.Sheldrick |
| 1991-1995 | - PhD Fonds National de la Recherche Scientifique (Belgique), (FNRS), Dir.: Prof. F.Durant |

Links

- <https://www.narilis.be/>
- <https://www.narilis.be/namedic>
- <https://platforms.unamur.be/pc2>
- <https://www.unamur.be/sciences/chimie/unites/ucpts> (french)
- <https://www.unamur.be/sciences/chimie/cbs> (french)

Degrees

- Ph. D, summa cum laude, FUNDP Namur - Belgium, 1995.
- B. S., magna cum laude, FUNDP Namur - Belgium, 1991; Prize of the Royal Society of Chemistry.

Scientific societies

- National Committee of Crystallography (Academy of Sciences- Belgium)
<https://sites.google.com/view/belgian-crystallography/>
- National Committee of Chemistry (Academy of Sciences - Belgium)
- Belgian Royal Society of Chemistry
- Société Française de Chimie Thérapeutique
- American Chemical Society

Awards

- Triennial Award RCS (Royal Society of Chemistry, Belgium) 2008.
- Incentive award Hungarian Society of Neurobiology 1998.
- Stas Award, Academy of Sciences (Belgium), 1996.
- Award of the Société Franco-belge de Pharmacochimie 1995.
- Award for best Master thesis RCS (Royal Society of Chemistry, Belgium) 1991.

Scientific output

- (co)author of over 340 international publications (> 7800 citations (Scopus), h index 45 (Scopus); (> 10200 citations (Google Scholar), 51 (Google Scholar)).
 - co-editor of Pharmaceutical Salts and Co-crystals, RSC Drug Discovery, 2011 ISBN: 978-1-84973-158-4)
 - (co)author of 5 chapters in books
 - active participation in over 70 (inter)national meetings; 14 oral communications - 6 plenary lectures
 - promotor of 25 PhD thesis (2 on-going)
- <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102732070#>
<https://scholar.google.fr/citations?hl=fr&user=TSA3vP4AAAAJ>
<https://researchportal.unamur.be/en/persons/johan-wouters/>
<https://orcid.org/0000-0002-4920-6857>

Expertise

- Structural Chemistry (crystallography)
- Structural Biology (protein crystallography, molecular modelling)
- Drug design, medicinal chemistry
- Crystal engineering

Talks (selection)

"Solid state engineering and characterization of (pharmaceutical) cocrystals" Crystallize Annual meeting, COST Action CM1402, Univ of Coimbra, Portugal, April 6 -8th 2016
 "Pharmaceutical Cocrystals: solid state engineering of pharmaceutical compounds". Francqui Symposium, VUB, Brussels (Belgium), June 4-6th 2015
 "Aux confins de la matière, la cristallographie et ses applications", festival nature de Namur, October 13th 2014
 "From catabolism of monoamines to the design, synthesis and biological evaluation of potential new anticancer agents ", St Joseph College, Bangalore (India), July 2012
 "La chimie biologique est-elle 'bio' ? " One-day meeting SRC, Gembloux (Belgium), October 2011 (plenary lecture at the occasion of the Triennial prize of the Royal Society of Chemistry)"
 "Benefits and limits of *in silico* predictions" Solvay Pharmaceuticals Conference, Switzerland, May 11th 2005
 "Mechanism of reversible inhibition of MAO". Virginia Tech, Blacksburg (USA), July 1992 (Harvey W. Peters Research Center Incentive Award)
 "Inhibition of MAO by befloxacitane". International Meeting of Psychiatry, Nice (France), May 1997
 "Mechanism of inhibition of MAO by oxazolidinones", International Meeting on Amine oxidases, Lake Balaton (Hungary), May 1998 (plenary lecture at the occasion of the Incentive Prize of the Hungarian Society of Neurobiology)

Promotion of thesis

3 on-going

Thesis presented:

- Characterization of the oligomeric interface of lactate dehydrogenase-B (LDH-B) through crystallographic and molecular dynamics approaches. Mégane VAN GYSEL (2023)
- Plasticity of human indoleamine-2,3-dioxygenases 1 and 2 through a structural approach combining crystallography and Molecular Dynamics studies. Manon MIRGAUX (2022)
- Biophysical and enzymological exploration of Mycobacterium tuberculosis phosphoserine phosphatase SerB2 self-assembly and regulation by L-serine. Elise PIERSON (2022)
- Small molecules as therapeutic options in Parkinson's disease: case of modulators of UCH-L1 and GLP-1 receptor. Kalina MAMBOURG (2022)
- Structural and inhibition study of phosphoserine phosphatase (SerB2) from *Mycobacterium tuberculosis*. Marie HAUFROID (2022)
- Drug-drug cocrystallization or salt formation as an alternative to combination drugs : A case study on clofazimine. Laurie BODART (2021)
- Potentialization of conventional chemotherapies by the discovery of chemosensitizers active in hypoxia or acting on the VKORC1 protein. Sebastien MARX (2019)
- Approche structurale et fonctionnelle de la première enzyme de la voie de la sérine : PHGDH, une cible potentielle pour le traitement du cancer. Quentin THEMANS (2019)
- Caractérisation structurale et fonctionnelle de la protéine membranaire 45A (TMEM45A) dans le cancer du sein triple-négatif. Thomas DALMASO (2019)
- Photochromic multicomponent crystalline materials based on N-salicylideneanilines. Andrea CARLETTA (2019)
- Etude structurale de la synthèse d'imines et de phtalimides par mécanochemie. Jean DUBOIS (2017)
- Etude structurale d'inhibiteurs non-nucléosidiques des ADN (cytosine-5) méthyltransférases, Gregoire RONDELET (2016)
- Conception, synthèse, caractérisation, évaluation pharmacologique et étude *in vivo* de dérivés de l'harmine en tant que nouvelles molécules aux propriétés anticancéreuses, Céline MEINGUET (2015)

- Caractérisation structurale et étude de l'inhibition de la 1-déoxy-D-xylulose-5-phosphate reductoisomérase (DXR) de *E.coli* et de la DXR-like de *B.abortus*, par des analogues de la fosmidomycine, Jenny POUYEZ (2014)
- Structural characterization of cyclodextrins : from inclusions complexes to Metal-Organic Frameworks (MOFs), Kossay ELASAAD (2013)
- Étude physico-chimique et structurale de la cocrystallisation de molécules-modèles de principes actifs potentiels, Anaëlle TILBORG (2013)
- Conception, synthèse et étude d'inhibiteurs de la tryptophane 2,3-dioxygénase (TDO), une cible prometteuse pour le traitement du cancer, Laurence MOINEAUX (2013)
- Conception, synthèse et évaluation d'inhibiteurs d'ADN méthyltransférases et d'histones désacétylases, Irving BOITTIAUX (2012)
- Rational design, synthesis, molecular modeling and evaluation of B-carboline and 5H-indeno[1,2-c]pyridazin-5-one derivatives as potential MAO and IDO inhibitors, Jérémy RENIERS (2011)
- Structural study of HIV-1 integrase inhibition by quinolones: contribution to the rational design of new inhibitors, Pierre VANDURM (2011)
- Etude structurale de l'inhibition des ADN (cytosine-5) méthyltransférases par des inhibiteurs non-nucléosidiques originaux, Julie BRAUN (2010)
- Le rôle des microémulsions dans le transport des médicaments à travers la peau : étude du rétinol et de l'ibuprofène, Caroline DESTREE (2010)
- Etude structurale comparative des Isopentenyl Diphosphate Isomérases de type 1 et 2, Jerome DE RUYCK (2008)
- Caractérisation structurale de la 5-lipoxygénase humaine et de son inhibition: support à la conception rationnelle d'inhibiteurs mixtes 5-LOX-COX-2, Caroline CHARLIER (2006)
- Rational approach of the reversible inhibition of type A and B MAO: design and synthesis of original 5H-indeno[1,2-c]pyridazin-5-one derivatives, Frédéric OOMS (2000)

Jury of other thesis

- 2023 Development and characterization of camelid antibody fragments (nanobodies) as theranostic agents against the beta-lactamases TEM-1, NDM-1 and CMY-2 – Frederic CAWEZ (ULiège)
- 2023 Crystal structure determination of dynamic fluorescent proteins – Thi Yen Hang BUI (KULeuven)
- 2023 Controlling selectivity by crystal engineering – through green chemistry – Carole BODY (UCLouvain)
- 2023 Borotriptycenes : development and reactivity of non-planar boranes – Arnaud OSI (UNamur)
- 2023 Étude structurale et mécanistique des undécaprényl pyrophosphate phosphatases impliquées dans le métabolisme du peptidoglycane chez *Escherichia coli* – François DELBRASSINE (ULiège)
- 2023 Towards multi-component pharmaceutical solid forms through crystal engineering - Fucheng LENG (UCLouvain)
- 2023 Extending the chiral resolution toolbox using cocrystallization - Fuli ZHOU (UCLouvain)
- 2022 Design and synthesis of Arginase 1 inhibitors - Julien PREVOST (UCLouvain)
- 2022 Development of carbohydrate analogues as mechanistic probes for the characterization of galactofuranoside hydrolases – Loïc CHENE (UNamur)
- 2022 Synthesis strategies towards new heterometallic and functionalized MOFs – Timothy STEENHAUT (UCLouvain)
- 2022 Triptycenes and helicenes as polyaromatic platforms for the design of bulky phosphines, boranes and bifunctional catalysts – Mathieu GAMA (UNamur)
- 2022 Fine-tuning photochromic properties of N-Salicylideneaniline derivatives using a crystal engineering – Gabriel MERCIER (UCLouvain)
- 2021 Design, Synthesis and Evaluation of Original 1-H-indol-3-yl Heterocyclic Derivatives as Tryptophan 2,3-Dioxygenase (TDO2) Inhibitors – Arina KOZLOVA (UCLouvain)
- 2021 Towards the total synthesis of momilactones. Asymmetric Diels-Alder reactions of quinones and sulfinylquinones for the synthesis of terpenes. – Loïc JEANMART (UNamur)
- 2020 Nefiracetam solid forms : from physicochemical properties enhancement by cocrystallization to chiral resolution through preferential crystallization – Xavier BUOL (UCLouvain)
- 2020 Discovering Conglomerates for Chiral Resolution by Crystallization – Aliou MBODJI (Univ de Rouen)
- 2020 Multi-Scale Quantum Chemistry Investigation of Molecular Switches: From Solution to Crystal -Jean QUERTINMONT (Unamur)
- 2020 Analyse de l'activité étudiante lors des séances de laboratoire de chimie : vers une compréhension des raisonnements adoptés lors de l'écriture de résultats expérimentaux et de l'acquisition des techniques de dilution et de titrage colorimétrique – Céline PICRON (UNamur)
- 2020 Synthesis and application of novel fullerenes and silsesquioxanes based structures – Valerio CINA (Univ di Palermo)
- 2019 Characterization of the anticancer properties of hydroxamate-based histone deacetylase inhibitors - Manon LERNOUX (LBMCC, Luxembourg-UNamur)
- 2019 Mechanistic study of PHGDH enzyme inhibition: towards the development of new anticancer drugs Quentin SPILLIER (UCLouvain)
- 2019 Synthesis of heptose mono- and bisphosphate analogues as modulators of the bacterial innate immunity and inhibitors of the bacterial lipopolysaccharide – Lina LIANG (UNamur)

2019 Influence des lipides de la membrane plasmique sur la structure et la fonction du récepteur opioïde μ par dynamique moléculaire gros grains - Marie-Ange ANGLADON (UNamur)

2018 Synthetic derivatives of natural polyphenols targeting the mycobacterial cell wall - Sydney VILLAUME (UNamur)

2018 Crystal engineering of molecular materials : design, synthesis and solid-state investigation of photoreactive and thermo/photochromic solids – Floriana SPINELLI (Uni Bologna)

2017 Conception des matériaux hybrides “cell(s) in shell” : synthèse, nanostructuration, fonctionnalisation et application – Li WANG (UNamur)

2017 Challenges in cocrystallization of chiral compounds – Natalia TUMAVOVA (UCL)

2016 Development of strategies for the highly selective functionalization of calixarenes and study of host–guest properties of calixarene-based molecular boxes - Roy LAVENDOMME (ULB)

2016 Novel approaches in cocrystal screening – Fanny GEORGE (UCL)

2016 Investigation of the surface lipoprotein export machinery of Bacteroidetes - Frederic LAUBER (UNamur)

2016 Structure of the protein phosphatase PP1 interactors Sds22 and NIPP1 – Ewald HEROES (KULeuven)

2016 On the intrinsic flexibility of the μ opioid receptor through multiscale modelling approaches - Mathieu FOSSEPRE (UNamur)

2015 Synthèse de glycosides de conformation contrainte en vue de l'inhibition d'hexosaminidases – Olivier MASSINON (UNamur)

2014 Synthesis and evaluation of anti-cancer properties of novel tetrahydro- β -carbolines derivatives - Alexandra MOTATU (ULB)

2014 Insertion de molécules à propriétés stimulables au sein d'une matrice polyampholyte - Pierre-Loïc JACQUEMIN (UCL)

2014 Probing peptide-nanomaterial interface by means of molecular dynamics – Federica DE LEO (UNamur)

2014 Conception de biomatériaux hybrides poreux adaptés à l'encapsulation de cellules animales pour la thérapie cellulaire – Grégory LEROUX (UNamur)

2013 Etudes structurales et fonctionnelles du système de sécrétion à deux partenaires HxuA/HxuB de Haemophilus influenzae – Stéphanie BAELEN (Univ Lille1)

2013 Structural and biochemical study of the proteins AmiC, NlpD and FtsW involved in the bacterial cell division – Mathieu ROCABOY (ULG)

2013 Discovery of novel inhibitors of the Mycobacterial cell wall – Ines N'GO (UNamur)

2013 Caractérisation génétique et biochimique du système de racemization du lactate chez Lactobacillus plantarum – Benoit DESGUIN (UCL)

2013 Synthèse et étude de nouveaux récepteurs ditopiques fonctionnalisés dérivés de calix[6]arènes : des calix[6]cryptamides aux calix[6]trens - Angélique LASCAUX (ULB)

2013 Structure Determination of GFP-like Proteins – Ngan NGUYEN BICH (KUL)

2012 Synthesis of 1-deoxy-D-xylulose 5-phosphate reductoisomerase inhibitors as antimalarials – Thomas VERBRUGGHEN (U Gent)

2012 Synthesis, pharmacological evaluation, and structure-activity relationships studies of sulfur-containing organic derivatives as monoacylglycerol lipase inhibitors – Coco KAPANDA (UCL)

2012 Étude de la discrimination chirale à l'état solide dans la série des dérivés du trans-1,2-diaminocyclohexane et d'un précurseur du paclobutrazol - GONELLA Silvia (Univ Rouen)

2012 Synthesis, physical properties and supramolecular organization of B-doped molecular materials – Simon KERVYN

2012 Multi-walled carbon nanotubes: decorated with metal nanocrystals and incorporated into metal matrices- Praveen MARTIS

2011 Four case studies on the impact of the heterogeneous equilibria on physicochemical behaviours of organic solids COUV RAT Nicolas, thèse européenne (Univ Rouen)

2010 Towards a modulation of the endocannabinoid signal: heterologous expression of the fatty acid amide hydrolase and tridimensional structure of the monoacylglycerol lipase – Geoffray LABAR (UCL)

2010 Design, synthesis molecular modelling and biological evaluation of modulators of the NF-kappa activation - Jérémie MORTIER

2009 Identification and characterization of the interaction between human Rab2 GTPase and Brucella spp. RicA protein - Bernard NKENGFAC

2009 Conception de cristaux photoniques à base d'opales inverses et de biostructures - François PIRET

2009 Etude de la communication pédagogique à l'université à travers les notes et les acquis des étudiants à l'issue du cours magistral - Mireille HOUART

2008 Développement d'empreintes digitales moléculaires basées sur les points critiques de la densité électronique: application à l'inhibition des cytochromes P450 - Julien BURTON

2008 Study of structural effects in molecules and polymers by theoretical simulation and interpretation of NMR spectra - Philippe D'ANTUONO

2008, Conception, synthèse et évaluation pharmacologique d'inhibiteurs originaux des anhydrases carboniques de type VII et IX - Anne THIRY

2006 Synthèse et étude de coumarines 3,6-disubstituées en tant qu'inhibiteurs de thrombine basés sur le mécanisme - Raphael FRÉDÉRICK

2006 Modification of acidophile character of xylanase from Scytalidium acidophilum by genetic engineering - Bassam AL BALAA

2006 Conception d'un senseur pour le dosage d'ions ferriques: immobilisation d'un ionophore fluorescent dans une matrice silicatée poreuse hautement structurée - Nicolas MONIOTTE

2005 Modification de domaines de liaison à la choline en vue de leur utilisation comme étiquette de purification de protéines recombinantes - Nathalie DE SCHREVEL

2005 Etude des enzymes régissant les processus de ramollissement chez la fraise (*Fragaria x ananassa*): implication des pectine méthylestérases et mise en évidence du rôle des pectate lyases par ARN interférence - Mallory DRAYE

2004 Molecular Physiology of hyperthermophiles : metabolic channeling of Carbamoyl phosphate, a thermolabile and potentially toxic intermediate – Jan MASSANT (VUB)

2004 Conception, synthèse et évaluation biologique de 2-thiohydantoïnes en tant qu'inhibiteurs potentiels des cyclooxygénases - Marie-Pierre GAUTHIER

2004 Les complexes métallo-organiques au cuivre (II), une nouvelle famille d'inhibiteurs de la protéase du virus de l'immunodéficiência humaine de type 1 - Marie LEDECQ

2004 Analyse et modélisation de nouveaux inhibiteurs non nucléosidiques de la transcriptase inverse du virus de l'immunodéficiência humaine de type 1 (VIH-1), Sandro BOLAND

2004 Des matériaux mésoporeux silicatés CMI-N aux matériaux méso-macroporeux hiérarchisés à aluminosilicatés - Alexandre LÉONARD

Promotion of Master thesis (5 last years)

2023 Identification de ligands de la phosphoserine phosphatase de *M.tuberculosis* dans la recherche d'antituberculeux potentiels – Wendy Mbock

2022 Solid states characterization of racemic Baclofen– Jeanne Body

2022 Physico-chemical and structural characterization of a new pharmaceutical target: the human Indoleamine-2,3-dioxygenase– Berta Vall

2022 Study of the oligomeric states of *Mycobacterium tuberculosis* (SerB2) and *Mycobacterium avium* (SerB) phosphoserine phosphatases – Florian De Pol

2022 Towards the understanding of hTDO2: a comprehensive study of the protein and its interactions with selective bioisosteric inhibitors – Tanguy Scaillet

2022 Synthesis and evaluation of UCH-L1 potential activators – Gilles Henon

2021 Optimisation des conditions de cristallisation de hIDO 1, une enzyme impliquée dans l'immunosuppression – Martin Storder

2020 Characterization of LDHB in order to identify some potential inhibitors – Jordane Goffart

2020 Study of the inhibition of *Mycobacterium leprae* phosphoserine phosphatase SerB by clofazimine – Beaujean Charlotte

2020 Structural study of salts combining anti-inflammatory drugs and clofazimine – Amélie Derlet

2019 Study of the structure and inhibition of the *Mycobacterium avium* phosphoserine phosphatase- Callaerts Nephthali

2019 Etude mécanistique de la phosphosérine phosphatase humaine, une enzyme impliquée dans la chimiorésistance au 5-fluorouracile dans le cancer du côlon : approches expérimentale et computationnelle - Mirgoux Manon

2018 Validation de composés chimiosensibilisants inhibant la résistance des cellules MDA-MB-231 au Taxol et des cellules HepG2 à l'Étoposide en hypoxie - Breuer Aurélie

2018 Etude de l'inhibition de SERB2, une phosphosérine phosphatase essentielle de *Mycobacterium Tuberculosis* : identification et évaluation de nouveaux inhibiteurs potentiels - Pierson Elise

2018 Cocrystallisation par liaisons halogènes de systèmes basés sur les anils et étude du photochromisme - Simon Margaux

2017 Ingénierie cristalline du thermo et photochromisme des N-salicylideneaminopyridines par cocrystallisation - Smulders Céline

2017 Apport de la mécanochimie dans la synthèse et la co-cristallisation de la fluorescéine et de dérivés nitro - Soupart Aline

2017 Recherche de composés chimiosensibilisants, inhibant la résistance au taxol induite par la protéine TMEM45A dans la lignée cellulaire MDA-MB-231 - Van Gysel Mégane

2017 Evaluation de nouveaux inhibiteurs de la phosphoglycérate déshydrogénase : étude de l'interaction entre le disulfirame et l'enzyme - Bodart Laurie

2017 Conception d'un dérivé 4-phénylthiazoline-2-thione comme un nouvel inhibiteur potentiel de l'indoleamine 2,3-dioxygénase humaine - Deskeuvre Marine

2017 Structural characterization of ligands for the PWWP domain of DNA methyl transferase 3B - Maniquet Antonin

2016 Cocrystallisation du (E)-2-methoxy-6-(pyridin-3-yliminomethyl)phenol : approche pour moduler le thermo et photochromisme à l'état solide.– Xavier BUOL.

2016 Etude de l'inhibition de l'indoléamine 2,3-dioxygénase : Conception et synthèse d'analogues du thiazole-2-thiol.– Marie HAUFROID

2015 Conception, synthèse et caractérisation physico-chimique et biologique de dérivés de l'harmine substitués par un groupement 4-méthylpyridine comme composés antiprolifératifs – Julien GUEBEL

2015 Etude structurale du domaine PWWP des DNMT3A et DNMT3B - Thomas DAL MASO

2015 Conception, synthèse et caractérisation physico-chimique et biologique de dérivés de l'harmine substitués par un groupement 2-méthylpyridine comme composés antiprolifératifs – Sébastien MARX

2014 Conception de composés anti-cancéreux ciblant le domaine PWWP des DNMT3a et DNMT3B – Quentin THEMANS

Supervision of Internships (5 last years)

Jérôme LAMBERT (2017), Elyse FIEVET (2017), Ugo VACCARO (2018), Jonas DUVIGNEAUD (2018), Marie DUBUISSON (2018), Adeline COURTOY (2018), Adrien LESNE (2019), Julien LABIE (2019), Danielle AHN (2019), Arnaud DEGEMBE (2020), Simon JONCKHEERE (2020), Guillaume COGNAT (2020), Maria PRINZO (2020), Simon CHEVAL (2021), Sophie ROUSSEAU (2021), Wendy MBOCK (2021), Isabella SILVA (2022), Gregory TROUKENS (2022), Emilie QUERTINMONT (2022), Robin ZANELLI (2022), Giudice TSAPE (2022), Laurine BOIDEQUIN (2023)