Ez a szerzetesrend Nursiai Szent Benedek rendjének egyik ága, melynek keletkezésére alkalmul szolgált, hogy Szent Benedek rendjét az eredeti fegyelemre és szellemre visszavezesse. Molesme-i Szent Róbert 1098 márciusában húsz rendtársával Dijon vidékén, Cîteaux mellett (latinul Cistercium, innen a név) telepedett le, egy elhagyatott, zord helyen, hogy ott, a világtól elzárva, könnyebben követhessék mindenben Szent Benedek szabályzatát. Szent Róbertnek egy év múlva vissza kellett térnie Molesme-be, utána Szent Alberik vette át az új telep irányítását, aki határozott lépéseket tett az önálló rend kifejlesztésére. Alapítójának tekinthető Harding Szent István is, aki Angliából származott.

Egy ideiglenes szabályzat (Instituta monachorum Cisterciensium de Molismo Venientium) összeállítása, a ruházat színének meghatározása (fehér habitus, barna, később fekete skapuláréval) és II. Paszkál pápától 1100. április 18-án kapott védelmi okirat: ezek szolgáltatták az önálló fejlődés alapjait. Az új rend a teljes szervezettséget a következő apát, Harding Szent István alatt, 1119-ben érte el, az úgynevezett Carta Caritatis szabályzattal.

Ugyancsak ezen apát idejében – a legválságosabb időben – virágzott fel az új rend, elsősorban azért, mert Szent Bernát harminc társával együtt belépett a rendbe, és egyéniségével az egész keresztény világban nevet és dicsőséget szerezve neki, a közösség belső életét is századokra megszentelte.

Rövidesen négy újabb apátság jött létre Cîteaux-ból: La Ferté (1113), Pontigny (1114), Clairvaux (1115) – amelynek Szent Bernát lett az apátja –, valamint Morimond (1115). Ezekből az apátságokból, mint Cîteaux hajtásaiból azután mind újabbak jöttek létre, így Szent Bernát élete végére (1153) már 343 kolostor létezett szerte Európában. A 14. században az összes férfi és női ciszterci kolostorok száma meghaladta az 1750-et.