1893年に1号温室が完成したのを皮切りに、その翌年には2号温室、1895年には3号温室が建設されました。これらは日本人の設計による初の大規模温室であったと言われています。

1896年には新たに建設された旧洋館御休所と温室とを結ぶ曲がり廊下が作られ、温室全体が完成しました。

旧洋館御休所では皇族によるパーティーや昼餐会が開かれ、温室は散策や休憩の場として利用されました。宮中で使用する新鮮な花や野菜はこの温室で育てられていました。温室では800種以上の洋ランの交配種が作出され、カトレヤ・シンジュクなど新宿の名を冠した独自品種が多数生み出されました。1914年には御苑の温室で栽培していた洋ランの一覧「The Orchid List of The Imperial Park Shinjuku, 1914」が刊行されました。今でも当時交配された品種の一部を鑑賞することができます。

しかし1945年、3度の大規模空襲により苑内はほぼ全焼という大きな被害を受け、温室、建物、植物の大部分を失いました。わずかに残った洋ランなどの貴重な植物は、苑内で集めた薪を燃やした熱を使って越冬させることでなんとか守ることができ、今日に伝えられています。